THÈSES

présentées

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

par

Joseph PRORIOL

1re Thèse :

CONTRIBUTION à l'APPLICATION de la THÉORIE des GROUPES SYMÉTRIQUES à l'ETUDE des SYSTÈMES de TROIS et QUATRE CORPS à MASSES EGALES en MÉCANIQUE QUANTIQUE

2ème THÈSE

PROPOSITIONS DONNÉES par la FACULTÉ

Soutenues le 23 Juin 1962 devant la Commission d'Examen :

MM. Ph. PLUVINAGE — Président, Rapporteur
J. YOCCOZ — Examinateurs
D. BERNARD — Examinateurs

THÈSES

présentées

A LA FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

pour obtenir

LE GRADE DE DOCTEUR ÈS SCIENCES PHYSIQUES

par

Joseph PRORIOL

R. UNIV.
BIBLIOTHEEK
LEIDEN

1ère Thèse :

CONTRIBUTION à l'APPLICATION de la THÉORIE des GROUPES SYMÉTRIQUES à l'ETUDE des SYSTÈMES de TROIS et QUATRE CORPS à MASSES EGALES en MÉCANIQUE QUANTIQUE

2ème THÈSE

PROPOSITIONS DONNÉES par la FACULTÉ

Soutenues le 23 Juin 1962 devant la Commission d'Examen :

MM. Ph. PLUVINAGE — Président, Rapporteur
J. YOCCOZ, D. BERNARD — Examinateurs

FACULTÉ DES SCIENCES DE L'UNIVERSITÉ DE STRASBOURG

Doyen

Professeur J.H. VIVIEN.

Doyens Honoraires

A. DANJON — A. KIRRMANN
P. LACROUTE — H.J. MARESQUELLE

Professeurs Honoraires

Ed. BAUER	P. de BEAUCHAMP	L. BOUNOURE
A. CHRETIEN	H. CARTAN	Cl. CHABAUTY
A. DANJON	J. DENY	Ch. EHRESMANN
M. FRECHET	G. FOEX	H. GAULT
L. HACKSPILL	A. HEE	Mme A. HEE
R. HOCART	A. KIRRMANN	G. LEMEE
P. L'HERITIER	A. LICHNEROWICZ	L. NEEL
H. OLLIVIER	G. RIBAUD	E. TERROINE
R. THIRY	H. VILLAT	Et. WOLFF

Professeurs

H. WEISS	T.	Physico-chimie des Hydrocarbures	H. SAUCIER	T.T.P	Minéralogie
G. HUGEL	T.	Chimie du Pétrole	R. ROHMER	T.T.P	Chimie
R. BONNET	T.	Chimie Biologique	Mle GILLET S.	T.T.P.	Paléontologie
H.J. MARESQUELLE	T.	Biologie végétale	Mle GAGNIEU A.	T.T.P.	Botanique
A. ROUSSEL	T.	Calcul différentiel et intégral et Théorie des fonctions.	R. THOM	T.	Analyse supérieure
			S. NIKITINE	T.	Physique générale
H. FORESTIER	T.	Chimie générale	F. STUTINSKY	T.	Physiologie générale
Ch. SADRON	T.	Physico-chimie Macromoléculaire	B. WURTZ	P.S.C.	Chimie biologique
J. ROTHE	T.	Physique du Globe	J. BRENET	T.T.P.	Chimie physique
P. LACROUTE	T.	Astronomie	G. OURISSON	T.T.P.	Chimie
J.H. VIVIEN	T.	Zoologie et Embryologie expérimentale	Fr. STEPHAN	P.S.C.	Zoologie
L. BOISSELET	T.	Chimie analytique du Pétrole	Cl. LEVI	T.T.P.	Biologie générale
A. MAILLARD	T.T.P.	Chimie	A. COCHE	P.S.C.	Physique nucléaire
S. GORODETZKY	T.	Physique générale et Physique nucléaire	R. CERF	T.T.P.	Physique
L. SACKMANN	T.T.P	Mécanique des Fluides	M. BERGER	P.S.C.	Mathématiques
J. BYE	T.	Chimie minérale et chimie Physique	J. FRENKEL	P.S.C.	Mathématiques
R. LOMBARD	T.	Chimie organique	P. TAGLANG	T.	Physique
Mle PEREY M.	T.	Chimie nucléaire	J.P. LONCHAMP	P.S.C.	Physique
Ph. PLUVINAGE	T.	Physique expérimentale	J. BOSCHER	P.S.C.	Mécanique des Fluides
S. GOLDSZTAUB	T.	Minéralogie et Pétrographie	A. DELUZARCHE	P.S.C.	Chimie
P. JOLY	T.	Biologie générale	J.B. DONNET	T.T.P.	Chimie physique
H. BENOIT	T.	Physique générale	R. ARMBRUSTER	P.S.C.	Physique
J.L. KOSZUL	T.	Topologie	A. ROCHE	P.S.C.	Physique du Globe
P. CUER	T.	Physique générale et Physique Corpusculaire	L. HIRTH	T.	Microbiologie
			J. YOCCOZ	T.	Physique théorique
G. MILLOT	T.	Géologie et Paléontologie			
R. LECOLAZET	P.S.C.	Physique du Globe			

Maîtres de Conférences

J. PARROD	Chimie	J. LEVISALLES	Chimie
A. SIGOT	Zoologie	D. BERNARD	Méthodes Mathématiques de la Physique
J. COGNE	Géologie		
R. WEY	Chimie	R. BARO	Physique
J. WUCHER	Physique	G. LAPRAZ	Botanique
A. FUCHS	Mathématiques	H. DANAN	Physique
Mme D. MAGNAC	Physique	M. ZISMAN	Mathématiques
Mme M. BRINI	Chimie	E. DANIEL	Physique
M. DAUNE	Physique	F. NORGUET	Mathématiques
J.P. ADLOFF	Chimie nucléaire	P. CHEVALLIER	Physiques
P. MIAHLE	Physiologie animale	J. LERAY	Physique
J. GREMILLARD	Mathématiques	Hl DURANTON	Botanique
G. PERNY	Physique	R. WEISS	Chimie
A. GALLMANN	Physique	P. CARTIER	Mathématiques

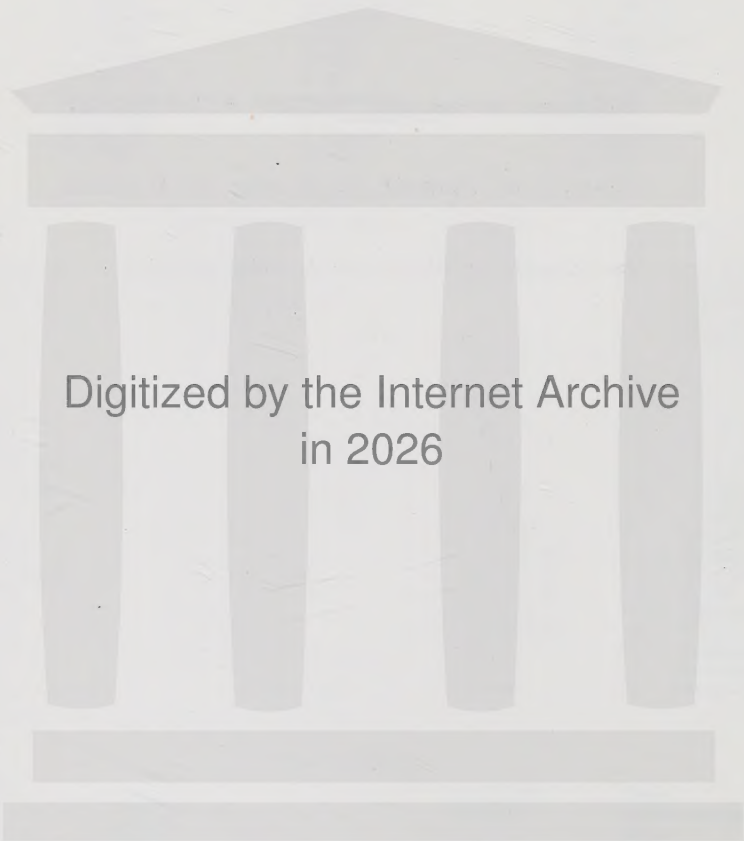
Secrétaire

G. SAINT-PE.

A Monsieur le Professeur PHILIPPE PLUVINAGE

Directeur de l'Institut de Physique de la Faculté

des Sciences de l'Université de STRASBOURG.


Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41548001_0026

INTRODUCTION

L'intérêt de l'étude des systèmes de trois corps et de quatre corps en physique nucléaire (H^3, He^3, He^4), réside essentiellement dans le problème de l'existence des forces pluriparticulaires.

D'une part la connaissance exacte de la nature et de la grandeur des forces qui existent entre deux nucléons et d'autre part la découverte d'une méthode puissante pour résoudre les problèmes de trois et quatre corps, permettraient, semble-t-il, par simple comparaison avec les résultats expérimentaux de caractériser les forces pluriparticulaires dans les états fondamentaux des noyaux simples.

Malheureusement on ne dispose pas encore d'un potentiel nucléaire à deux particules qui soit satisfaisant. Les potentiels empiriques, comme celui de GAMMEL - THALER, qui sont basés sur les expériences de diffusion, ne sont pas les seuls possibles. Par ailleurs les problèmes de trois et quatre corps restent réfractaires à toute tentative de résolution exacte. Dans les calculs numériques on emploie couramment la méthode de variation avec des fonctions d'onde très simplifiées. Dans de telles conditions le problème des forces pluriparticulaires perd évidemment de son intérêt pratique. Pourtant malgré ces difficultés on a pu obtenir de nombreuses indications sur l'état fondamental du triton : influence des divers types de forces, proportion des états S, P, D, valeur de l'énergie coulombienne de He^3. Mais les résultats généraux relatifs à He^4 restent assez peu nombreux.

L'équation de SCHRÖDINGER non relativiste demeure le point de départ de tous les travaux sur les problèmes de trois et quatre nucléons. On suppose ordinairement que les nucléons sont de masses égales et que les forces nucléaires

sont indépendantes de leur charge. La répulsion coulombienne est traitée comme une perturbation. En attachant à chaque nucléon trois variables d'espace, une variable de spin et une variable de spin isobarique, un ensemble de N nucléons est considéré comme un ensemble de N fermions identiques. Les fonctions des variables d'espace, les fonctions de spin et les fonctions de spin isobarique qui entrent dans la fonction d'onde antisymétrique possèdent, cependant, certaines symétries qui sont définies à partir des résultats de la théorie des groupes symétriques.

Sans traiter complètement les problèmes de trois et quatre nucléons, nous nous attachons, dans ce travail, à perfectionner la méthode de résolution de l'équation de SCHRÖDINGER. Le classement des fonctions d'espace de N nucléons suivant leurs diverses symétries et la construction d'un ensemble de fonctions de base pour représenter les fonctions d'espace faciliteront la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER.

Cette étude est divisée en six chapitres.

Le premier est une analyse bibliographique.

Dans le deuxième nous rappelons quelques résultats de la théorie des groupes symétriques qui s'avèreront nécessaires dans les chapitres suivants. Nous définissons les symétries des fonctions, symétrie entière, antisymétrie entière et symétrie intermédiaire.

Le troisième expose la méthode de classification des fonctions d'espace du triton et de la particule α suivant les divers types de symétries.

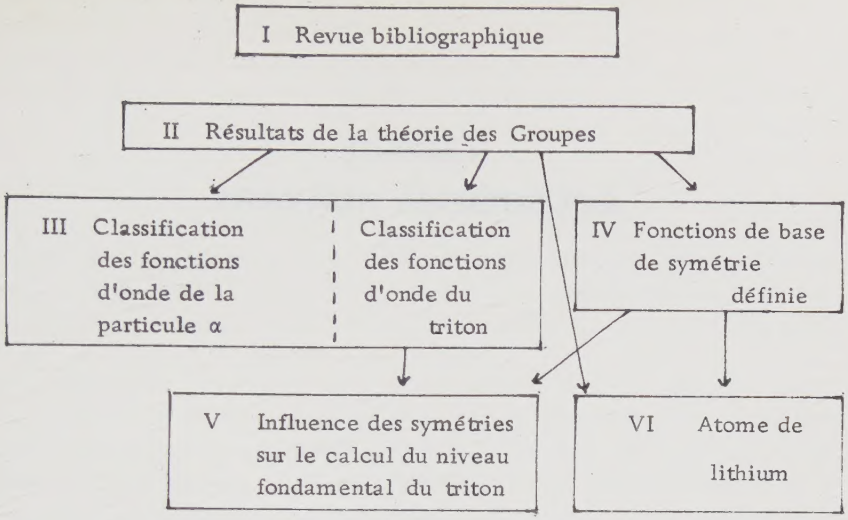
Dans le quatrième nous donnons plusieurs méthodes pour construire des fonctions de base de symétrie définie. La plus importante est valable pour un système de trois particules identiques. Les fonctions de base sont fonctions propres de deux opérateurs invariants pour les permutations des particules.

Nous chiffrons dans le cinquième chapitre l'importance des symétries dans le calcul du niveau fondamental du triton.

Le problème de trois électrons et le problème de trois nucléons présentent des analogies au point de vue des symétries. Dans le sixième chapitre nous formons des fonctions d'onde de symétrie définie pour l'état fondamental de l'atome de lithium. Nous employons d'une part les fonctions de base du chapitre quatre et d'autre part des résultats du chapitre deux pour calculer le niveau d'énergie de l'état fondamental.

En appendice figurent les tables de fonctions de base comme aussi les tables qui ont servi à l'exécution des calculs numériques.

Le tableau suivant donne l'organisation des divers chapitres.



Ce travail a été préparé à la Faculté des Sciences de l'Université de STRASBOURG sous la direction de Monsieur le Professeur Philippe PLUVINAGE, Directeur de l'Institut de Physique. Je le remercie de la bienveillance avec laquelle il a bien voulu, suivre l'élaboration de cette thèse. Ses conseils m'ont aidé à surmonter de nombreuses difficultés. Il a pris une part active à la détermination des polynomes de symétrie définie pour les fonctions d'onde d'un système de trois particules identiques.

Je remercie également Monsieur le Professeur Jean YOCCOZ pour les conseils qu'il a bien voulu me donner. Il m'a aidé à mettre au point le chapitre II ; le résultat relatif au développement du produit tensoriel de deux représentations irréductibles lui est dû. Il m'a également conseillé dans le calcul de l'état fondamental du triton.

Monsieur Gilbert MUNSCHY m'a fait bénéficier de son expérience des polynomes orthogonaux : de nombreux résultats du chapitre IV ont été obtenus grâce à son aide. Nous avons déterminé en commun les fonctions d'onde approchées de symétrie définie pour l'état fondamental de l'atome de lithium. Je le remercie vivement de cette collaboration qui m'a beaucoup aidé dans mon travail.

---ooOoo---

CHAPITRE I

TRAVAUX ANTÉRIEURS

Dans ce chapitre nous passerons d'abord en revue les travaux consacrés à la classification des fonctions des variables radiales du triton et de la particule α. Les différents calculs numériques effectués pour déterminer le niveau fondamental du triton nous fourniront ensuite des indications générales sur ce niveau d'énergie. L'examen de quelques travaux relatifs aux systèmes de polynomes orthogonaux nous donnera l'occasion de présenter les raisons qui nous ont conduits à construire des polynomes de symétrie définie. Nous critiquerons enfin des calculs relatifs à l'état fondamental de l'atome de lithium.

I - 1. - CLASSIFICATION DES FONCTIONS DU TRITON ET DE LA PARTICULE α.

Les niveaux fondamentaux du triton, de He^3 et de la particule α ont un certain nombre de caractéristiques bien déterminées. On connait les énergies de liaison et l'énergie coulombienne de He^3. Avec des forces nucléaires qui ont des composantes centrale, tensorielle et spin-orbite, les bons nombres quantiques sont J et J_z pour le moment angulaire total, les nombres de charge T et T_3 ainsi que la parité. Le tableau suivant donne les valeurs de ces grandeurs pour les noyaux envisagés [141]

Noyau	Energie de liaison	Energie coulombienne	J	J_z	T	T_3	Parité
Triton	8,48 Mev		$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	P
He^3		0,76 Mev					
Particule α	28,29 Mev		0	0	0	0	P

L'état fondamental est alors composé d'états S, P et D. Le nombre des variables d'espace est de trois pour le triton et de six pour la particule α, quand on a fixé le centre de gravité à l'origine. La fonction d'onde qui doit être antisymétrique pour la permutation de deux nucléons contient des fonctions des variables radiales, des fonctions de spin et des fonctions de spin isobarique qui possèdent toutes des caractères de symétries bien déterminés.

Une première classification des fonctions des variables radiales du triton a été faite par VERDE [121] [122] [135]; le calcul numérique effectué avec des forces centrales n'utilise que la fonction entièrement symétrique en négligeant une fonction entièrement antisymétrique et deux fonctions de symétrie intermédiaire.

Une deuxième classification a été faite par BLATT et DERRICK [145] dans le but d'utiliser des forces contenant un terme tensoriel et un terme spin-orbite. Les six variables attachées au triangle formé par les trois particules sont divisées en deux groupes : trois angles d'EULER donnent l'orientation du triangle dans l'espace et les trois distances r_{ij} entre deux particules donnent la forme du triangle. En combinant linéairement des produits de fonctions de spin et de fonctions de spin isobarique, on forme des fonctions de spin-charge qui appartiennent à des symétries déterminées. On forme des fonctions des états S, P et D en multipliant les fonctions de spin-charge et les fonctions des angles d'EULER. Les nouvelles fonctions obtenues sont multipliées par des fonctions des variables r_{ij} pour former la fonction d'onde antisymétrique. Dans l'état S il faut quatre fonctions radiales, dans les états P et D il en faut six pour chacun d'eux. La classification de l'état S redonne celle de VERDE. Au paragraphe suivant nous parlerons des calculs numériques exécutés par BLATT et DERRICK.

La méthode précédente est bonne pour le triton mais n'est pas applicable à la particule α. On définit péniblement les angles d'EULER qui orientent le tétraèdre formé par les quatre particules mais il est pratiquement impossible de calculer le nouvel hamiltonien.

Pour représenter les six variables radiales de la particule α, il est plus simple d'employer trois vecteurs indépendants. C'est cette méthode qu'utilisent SCHWINGER [204] ROBERTS [128] WANG [212] et COHEN [213] [214]. Pour former les fonctions des états S, P, D, on construit généralement des opérateurs en combinant convenablement les vecteurs repérant les particules et les opérateurs de spin $\vec{\sigma}_1, \vec{\sigma}_2, \vec{\sigma}_3$ et $\vec{\sigma}_4$. On fait ensuite agir ces opérateurs sur une fonction comportant les variables de spin et de spin isobarique. Les fonctions obtenues sont combinées à des fonctions des distances mutuelles r_{ij} pour construire la fonction d'onde antisymétrique. Pour décrire l'état S, il faut quatre fonctions, seize pour l'état P et douze pour l'état D.

On peut reprocher à cette méthode de ne pas faire une séparation

complète entre les variables d'espace et les variables de spin-charge. La méthode que nous proposerons pour classer les fonctions de la particule α partira des fonctions de spin-charge avec toutes leurs symétries. Nous appliquerons la même méthode pour classer les fonctions du triton en repérant les trois nucléons par vecteurs appropriés.

I - 2 - CALCULS NUMERIQUES SUR LE TRITON.

Nous ne connaissons pas parfaitement les forces qui existent entre deux nucléons. Cependant les modèles de potentiels qui ont été proposés sont voisins des potentiels réels, de sorte que l'on peut essayer de tirer quelques indications générales des calculs numériques. Ces calculs sont nombreux pour le triton mais beaucoup plus rares pour la particule α. Nous n'envisagerons que les conclusions relatives au noyau d'hydrogène lourd.

La plupart des calculs effectués ne tiennent compte que de la fonction entièrement symétrique et négligent les autres. La méthode de variation est couramment utilisée avec des fonctions simples.

Certains auteurs ont employé d'autres méthodes intéressantes ou ont introduit des fonctions de symétrie intermédiaire. Parmi les travaux effectués dans ce sens nous citerons les travaux suivants :

SVARTHOLM [116] emploie la méthode de variation-itération : il part d'une fonction d'essai gaussienne et se sert de la représentation des moments. La convergence est rapide. Il n'emploie que des forces centrales.

MANG et WILD [141] qui se basent sur un calcul de BRENIG [138] appliquent aux noyaux légers la méthode de BRUECKNER utilisée pour les noyaux lourds. La fonction d'onde est une combinaison de produits de fonctions individuelles de chaque nucléon ; le potentiel est transformé en potentiel d'oscillateur pour la facilité des calculs. Les forces sont centrales à cœur dur.

Les calculs de BLATT et DERRICK [145] [147] sont les plus élaborés. Ces auteurs utilisent le potentiel de GAMMEL-THALER à cœur dur avec des composantes tensorielle et spin-orbite. Ils calculent les divers éléments de matrices d'après la classification des fonctions du triton qu'ils ont établie. Ils forment les fonctions des variables radiales de symétrie entière et de symétrie intermédiaire à partir des fonctions :

$$\left.\begin{array}{l} u = r^{-1} \exp\left[-\gamma\,(r-r_o)\right] \\ v = \exp\left[-\varepsilon\,(r-r_o)\right] u \end{array}\right\} \left\{ 1 - \exp\left[-\delta\,(r-r_o)\right] \right\}$$

Ils ajustent les paramètres suivant la méthode de variation. Ils exécutent leurs calculs sur une machine électronique en utilisant la méthode de Monte-Carlo. Ils trouvent comme énergie de liaison 4 Mev : ce résultat est loin de la valeur expérimentale.

Nous pouvons déduire quelques propriétés générales des divers calculs effectués. Sans décrire la méthode employée par chaque auteur, nous groupons les résultats obtenus.

Les forces centrales ajustées d'après les données expérimentales du problème de deux corps donnent, pour le triton, une énergie de liaison plus grande que la valeur expérimentale (THOMAS [104], SVARTHOLM [116] FESCHBACH [129]). Les forces tensorielles de même portée que les forces centrales qu'utilisent GERJOY et SCHWINGER [115] ne conviennent pas pour le triton, tandis que les forces de portée différente fournissent de meilleurs résultats (FESCHBACH [126]). L'effet général des forces tensorielles consiste à relever le niveau fondamental, il compense en partie l'effet contraire produit par les forces centrales.

FESCHBACH et RUBINOW [129], OHMURA, YAMADA et MORITA [133] [136], MANG et WILD [141] étudient notamment l'influence du cœur dur. La présence, dans le potentiel, d'un cœur dur diminue l'énergie de liaison du triton et l'énergie coulombienne de He^3.

DERRICK [146] donne la contribution des diverses symétries à l'énergie de liaison du triton. La fonction entièrement symétrique de l'état S contribue pour 89,5 % à l'énergie de liaison, les fonctions de symétrie intermédiaire du même état pour 0,59 % et les fonctions de symétrie intermédiaire de l'état D pour 9,9 % . La contribution de l'état P est négligeable. Le mauvais résultat (4 Mev) obtenu pour l'énergie de liaison est dû à la part trop importante faite aux forces tensorielles par le potentiel de GAMMEL-THALER que DERRICK utilise. Le 9,9 % est donc trop fort. FESCHBACH [126] qui ne se souciait pas des symétries des fonctions radiales avait trouvé une contribution des états D de l'ordre de 3,1 %.

L'état S symétrique est prépondérant. On trouve dans ce résultat une justification à postériori de l'emploi unique de la fonction symétrique dans les calculs antérieurs de l'état fondamental.

DERRICK n'a pas envisagé la fonction antisymétrique de l'état S. En reprenant le calcul ci-dessus avec des forces uniquement centrales, nous montrerons que la contribution de cette fonction est négligeable. Nous calculerons également l'influence de la symétrie intermédiaire sur l'énergie coulombienne de He^3. DERRICK n'envisage pas ce cas.

I - 3 - POLYNOMES ORTHOGONAUX DANS LE TRIANGLE

Aucun travail sur le triton, n'emploie, pour approcher les fonctions des variables radiales, des fonctions de base possédant une des trois sortes de symétrie. Nous nous proposons de combler cette lacune en construisant des polynomes à deux variables orthogonaux dans un triangle et possédant une des trois symétries.

Plusieurs auteurs ont déjà construit des polynomes à deux variables définis dans un triangle. APPEL et KAMPE de FERIET [401] ont étudié une série de polynomes qui généralisent la fonction hypergéométrique. Ces polynomes sont fonctions propres d'un seul opérateur ; les polynomes de degrés différents sont orthogonaux.

MUNSCHY et PLUVINAGE [406] [407] [410] ont construit d'autres polynomes ; ils les rendent fonctions propres de deux opérateurs commutables ; ils sont orthogonaux deux à deux.

Enfin KOSCHMEIDER [402] [404] [408] a négligé les opérateurs et a construit les polynomes "sur mesure" pour être orthogonaux dans le triangle.

Malheureusement aucun de ces polynomes ne possède une des trois symétries que nous désirons. Pour construire nos fonctions de base définies dans un triangle, nous décrirons différentes méthodes. Nous les développerons d'abord en série de polynomes d'APPELL ou de MUNSCHY-PLUVINAGE : nous devrons alors calculer les coefficients de ces développements. Mais la principale méthode consiste à définir deux opérateurs commutables et nos polynomes seront fonctions propres de ces opérateurs.

I - 4 - ATOME DE LITHIUM.

Un certain nombre de travaux ont été consacrés à l'atome de lithium, mais ils sont moins nombreux et moins importants que ceux qui portent sur l'atome d'hélium.

Dans tous les travaux effectués avant 1930 et dans le travail de WILSON [501] la fonction d'onde est formée à l'aide du déterminant de Slater en partant de fonctions hydrogénoïdes. Les paramètres sont calculés à l'aide de la méthode de variation. Avec trois paramètres WILSON obtient - 7,41 ua pour l'energie de l'état fondamental contre - 7,478 ua pour la valeur expérimentale.

Pour former la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome de lithium, HUANG [502] utilise les termes des variables radiales qui figurent dans la fonction d'onde d'HYLLERAAS de l'état $1\,s^2$ de l'hélium. Il multiplie ces termes par les termes de la fonction hydrogénoïde 2 s du troisième électron. Il obtient ainsi une série de termes qu'il combine linéairement. Une multiplication par les fonctions de spin de trois électrons et une sommation avec permutation des électrons permettent d'arriver à une fonction d'onde antisymétrique.

Les paramètres sont déterminés par la méthode de variation. Avec sept paramètres, l'énergie calculée de l'état fondamental est E = - 7,457 ua.

WALSH et BOROWITZ [508] procèdent différemment. Ces auteurs utilisent une méthode de P. PLUVINAGE définie pour l'atome d'hélium. La fonction des variables d'espace est de la forme

$$\phi = f_1(r_1)\ f_2(r_2)\ f_3(r_3)\ U_o(r_{12})\ U_o(r_{23})\ U_o(r_{31})$$

où les f_i sont des fonctions hydrogénoïdes et $U_o(r_{ij})$ une fonction de choc d'énergie nulle. La fonction d'onde est convenablement antisymétrisée par rapport aux variables d'espace et de spin. L'hamiltonien du système s'écrit

$$H = H_o + H'$$

H_o est choisi de telle façon que la fonction ϕ soit fonction propre de cet opérateur, H' est alors traité comme une perturbation. Les calculs numériques sont assez complexes et nécessitent quelques approximations. L'énergie calculée de l'état fondamental est E = - 7,395 ua. Si l'on utilise la méthode de HUANG on a besoin de trois paramètres pour trouver cette valeur.

Les méthodes précédentes donnent de bons résultats numériques. Mais aucun auteur ne précise les symétries des fonctions des variables radiales des trois électrons. Dans notre travail nous essayerons de combler cette lacune. Nous utiliserons également nos fonction de base pour effectuer le calcul numérique de l'état fondamental.

CHAPITRE II

GROUPES SYMÉTRIQUES

Les équations d'évolution des systèmes de trois et quatre corps en Mécanique Quantique sont invariantes par rapport aux groupes symétriques de degré trois et quatre ; les fonctions d'onde de ces systèmes possèdent des propriétés simples de transformation par rapport à ces groupes. Dans ce chapitre nous rappelons les propriétés des groupes symétriques que nous utiliserons dans notre étude.

Après les définitions courantes des groupes symétriques nous exposons la méthode de construction des représentations irréductibles et quelques résultats sur l'utilisation des caractères des groupes. Un théorème dû à WIGNER relatif aux fonctions propres, d'un opérateur invariant par rapport au groupe symétrique nous conduit à introduire les définitions des symétries de ces fonctions propres. Nous construisons ensuite, à l'aide des éléments du groupe des opérateurs qui nous permettent de former des fonctions de symétrie déterminée. Nous nous occupons enfin du produit tensoriel de deux représentations.
Dans cet exposé nous donnons uniquement des résultats.

Pour présenter les définitions et quelques propriétés des groupes nous nous sommes inspirés du cours de MESSIAH [301]. La méthode de construction des représentations irréductibles est tirée de RUTHERFORD [302]. Nous utilisons les résultats de la théorie des caractères exposée par LITTLEWOOD [303]. L'application du groupe symétrique aux fonctions est due à WIGNER [304].

II - 1 - GROUPE SYMETRIQUE - REPRESENTATION DU GROUPE.

Définition du groupe symétrique. On appelle groupe symétrique de degré n ou groupe S_n le groupe des permutations de n objets. Nous désignerons les permutations par R, S, T ...

Ordre du groupe. n objets identiques peuvent être permutés entre eux de n ! manieres. L'ordre du groupe S_n est N = n!

Cycle. On peut noter une permutation de cinq objets

$$R = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 5 & 4 & 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} \qquad (1)$$

La deuxième ligne indique l'ordre des objets après permutation . On remarque que la permutation R comporte deux permutations circulaires.

(153) : 5 prenant la place de 1, 3 de 5 et 1 de 3

(24) : 2 et 4 échangés

On peut écrire R = (153) (24) et on dit qu'elle comporte deux cycles d'ordre trois et deux respectivement.

Classe. Deux éléments R et S sont conjugués l'un de l'autre s'il existe un élément $T \in S_n$ tel que

$$R = T\,S\,T^{-1}$$

L'ensemble des conjugués d'un élément donné S est par définition une classe du groupe. On démontre que les permutations qui se décomposent en un meme nombre de cycles de meme ordre appartiennent à la meme classe.

La classe C_a qui se décompose en α_1 cycles d'ordre 1, α_2 cycles d'ordre 2 . . . α_p cycles d'ordre p est représentée par

$$(1^{\alpha_1}\ 2^{\alpha_2}\ \ldots\ p^{\alpha_p}) \qquad \text{avec} \qquad \sum p\,\alpha_p = n$$

Le nombre d'éléments de C_a est

$$h_a = \frac{n\ !}{1^{\alpha_1}\ 2^{\alpha_2} \ldots p^{\alpha_p} \ldots \alpha_1\ !\ \alpha_2\ !\ \ldots\ \alpha_p\ ! \ \ldots} \qquad (2)$$

Transposition. Un cycle (ij) d'ordre deux est appelé transposition. On peut former tous les éléments du groupe S_n a l'aide de produits de transpositions. Une permutation est paire (resp. impaire) si elle est formée d'un nombre pair (resp. impair) de transpositions.

Représentations linéaires. Si à chaque élément R, S, T du groupe symétrique on fait correspondre une matrice carrée F (R), F (S) . . . telle que F (R). F (S) = F (T) chaque fois que RS = T, on dit que les matrices F forment une représentation du groupe.

Dimension d'une représentation. Le nombre de lignes ou de colonnes de chaque matrice donne la dimension de la représentation.

Base de la représentation. Chaque matrice représente un certain opérateur linéaire d'un espace vectoriel et définit donc une transformation linéaire des vecteurs de cet espace qui forment une base (pas nécessairement orthonormée) de la représentation.

Représentations équivalentes. Si M est une matrice de même dimension que F, M^{-1} F M est dite équivalente à la matrice F et la représentation à l'aide de ces nouvelles matrices est équivalente à la représentation F du groupe.

Réductibilité complète. S'il est possible de trouver une représentation équivalente à la représentation F et telle que les nouvelles matrices soient de la forme

$$M^{-1} F M = \begin{pmatrix} F^1 & O \\ O & F^2 \end{pmatrix} \qquad (3)$$

où F^1 et F^2 sont des matrices carrées, on dit que F est réductible en F^1 et F^2. Si F^1 et F^2 ne peuvent pas être réduites on dit que ces matrices sont irréductibles. On notera alors

$$F \simeq F^1 + F^2 \qquad (4)$$

II - 2 - REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DU GROUPE SYMETRIQUE S_n.

Partition de n. Une partition $\lambda \equiv [\lambda_1, \lambda_2, \ldots \lambda_k]$ de l'entier n est une suite d'entiers positifs rangés dans l'ordre $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k$ et dont la somme est égale à n. Comme la structure cyclique d'une permutation est définie par une partition bien déterminée de n, chaque partition de n définit une classe de S_n.

Diagrammes de YOUNG. Une partition donnée peut être représentée par son diagramme de YOUNG : c'est un réseau de n carrés arrangés en k lignes placées les unes au dessous des autres, la première ligne comprenant λ_1 carrés, la seconde λ_2 carrés . . . la kième λ_k carrés.

Par exemple pour n = 3

les partitions de 3 sont [3] [21] [111] ou $[1^3]$

et les diagrammes de YOUNG

Pour n = 4

Partitions : [4] [31] [22] [211] ou $[21^2]$ $[1^4]$

Diagrammes :

Partitions associées. Deux partitions sont associées l'une de l'autre si leurs diagrammes de YOUNG se déduisent l'un de l'autre par échange des lignes et des colonnes. Les partitions [31] et $[21^2]$ sont associées.

Tableaux de YOUNG. On peut répartir de n ! façons différentes les n premiers

entiers dans les n cases d'un diagramme. On obtient ainsi les tableaux de YOUNG. Nous appellerons tableaux standards t^{λ}_{u} attachés à la partition λ ceux dont les entiers inscrits dans les cases vont en croissant dans chaque ligne et dans chaque colonne.

On classe les tableaux standards suivant un ordre bien déterminé. Il est évident que le dernier entier n doit apparaître à l'extrême droite d'une ligne ou au fond de quelque colonne. Les tableaux dans lesquels n apparaît dans la dernière ligne viennent avant ceux dans lesquels n apparaît dans l'avant dernière ligne. Ces derniers viennent avant ceux dans lequel n apparaît dans l'avant-avant dernière ligne. Les tableaux qui ont n sur la même ligne sont classés par rapport à n - 1 suivant la même méthode.

Nombre de représentations irréductibles. Le nombre de représentations irréductibles de S_n est égal au nombre L de partitions de n ou encore au nombre L de classes de S_n.

Dimension d'une représentation irréductible. La dimension de la représentation irréductible correspondant à la partition λ est égale au nombre de tableaux standards t^{λ}_{u}. Ce nombre est égal à $l_{\lambda} \; (1 \leqslant u \leqslant l_{\lambda})$

$$l_{\lambda} = \frac{n!}{m_1! \; \ldots \; m_k!} \; \Delta \; (m)$$

avec $\qquad m_i = \lambda_i + k - i \qquad\qquad i = 1, 2, \ldots k \qquad (5)$

$$\Delta \; (m) = \prod_{j<q} (m_j - m_q)$$

Ainsi $\qquad l_{[21]} = l_{[22]} = 2 \qquad \ldots \qquad l_{[31]} = l_{[21^2]} = 3$

La somme des carrés des dimensions des diverses représentations irréductibles de S_n est égal à l'ordre du groupe

$$n! = \sum_{(\lambda)} l^2_{\lambda}$$

La sommation est étendue à toutes les partitions λ de n.

Construction de la forme orthogonale des représentations irréductibles des transpositions. On construit les éléments de la matrice F^{λ} (k-1, k) relative à la partition λ et représentant la transposition (k-1, k) en utilisant la méthode suivante.

On considère les l_{λ} tableaux standards $t^{\lambda}_{1} \ldots t^{\lambda}_{r} \ldots t^{\lambda}_{l_{\lambda}}$ classés dans l'ordre. Les éléments de la matrice F^{λ} sont

a) + 1 dans la r, rième position si t^{λ}_{r} a k-1 et k dans la même ligne.

b) - 1 dans la r, rième position si t^{λ}_{r} a k-1 et k dans la même colonne.

c) $-\rho$, $\sqrt{1-\rho^2}$ r, rième , r, sième

dans les positions (6)

$\sqrt{1-\rho^2}$, ρ s, rième , s, sième

si $r < s$ et t_s^{λ} est obtenu à partir de t_r^{λ} en interchangeant k-1 et k.

Si k-1 apparaît dans la i, jième position et k dans la m, nième position de t_r^{λ} alors

$$\frac{1}{\rho} = (j-i) - (n-m)$$

d) 0 partout ailleurs

En partant des matrices représentant les transpositions (k-1, k) on peut reconstituer les matrices de tous les éléments du groupe : $F^{\lambda}(R)$, $F^{\lambda}(S)$ ...

Nous donnons en appendice les matrices des représentations des transpositions pour S_3 et S_4

Propriétés des éléments de matrices des représentations irréductibles. Les éléments de matrices des représentations irréductibles vérifient les deux relations suivantes

$$\sum_R F^{\lambda}_{ij}(R)\, F^{\lambda' *}_{i'j'}(R) = \frac{N}{l_{\lambda}}\, \delta_{\lambda\lambda'}\, \delta_{ii'}\, \delta_{jj'} \qquad (7)$$

La sommation ci-dessus est étendue à tous les éléments du groupe.

$$\sum_{j=1}^{L} \sum_{\alpha,\beta=1}^{l_j} \frac{l_j}{N} F^{j}_{\alpha\beta}(S)\, F^{j *}_{\alpha\beta}(T) = \delta_{ST} \qquad (8)$$

II - 3. CARACTERES DU GROUPE SYMETRIQUE.

Définition. Les caractères d'une représentation sont les traces des matrices de la représentation.

Des représentations équivalentes ont le même système de caractères.

Les matrices représentant les éléments d'une même classe ont le même caractère. Nous désignerons par $\chi(a)$ le caractère de la classe C_a dans la représentation F et par $\chi^j(a)$ le caractère de la classe C_a dans la représentation irréductible F^j.

Propriétés des caractères. Les caractères des représentations irréductibles vérifient les relations suivantes

$$\sum_{a=1}^{L} \frac{h_a}{N} \chi^{j}(a) \chi^{k*}(a) = \delta_{jk} \qquad (9)$$

La sommation est étendue à toutes les classes du groupe au nombre de L.

Calcul des caractères. Le calcul complet des caractères de S_n est compliqué, mais quelques phases de ce calcul sont simples, nous les donnons ci-dessous.

- Le caractère d'une représentation dont le diagramme de YOUNG n'a qu'une seule ligne est égal à + 1 quelle que soit la classe.

- Le caractère d'une représentation dont le schéma n'a qu'une seule colonne vaut + 1 dans les classes paires et - 1 dans les classes impaires.

- Le caractère d'une représentation irréductible de diagramme $\lambda \equiv [\lambda_1, \ldots \lambda_k]$ dans la classe des transpositions est donné par

$$\chi(\text{transp}) = \frac{{}^{l}\lambda}{k(k-1)} \left[\sum_{j=1}^{k} \lambda_k (\lambda_k - 2j + 1) \right] \qquad (10)$$

${}^{l}\lambda$ est la dimension de la représentation irréductible liée à la partition λ.

- Deux représentations irréductibles dont les diagrammes sont associés ont le même caractère dans une classe paire et des caractères opposés dans une classe impaire.

Tables des caractères. LITTLEWOOD [30B] donne les tables des caractères des diverses représentations pour les différentes classes pour $2 \leqslant n \leqslant 10$. Nous reproduisons en appendice les tables pour n = 3 et n = 4.

II - 4 - REDUCTION D'UNE REPRESENTATION

Dénombrement des composantes irréductibles. Pour connaître les coefficients n_j de la décomposition

$$F \simeq \sum_{j=1}^{L} n_j F^j \qquad (11)$$

d'une représentation F en parties irréductibles il suffit de connaître son système de caractères $\chi(a)$ et le système des caractères des L représentations irréductibles du groupe. En utilisant les propriétés des caractères on trouve

$$n_j = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} h_a \chi^{j*}(a) \chi(a) \qquad (12)$$

Changement de base. La réduction de la représentation F s'opère à l'aide d'une matrice M telle que

$$M^{-1} F M = \begin{pmatrix} F^1 & 0 \\ 0 & F^2 \end{pmatrix} \qquad (13)$$

qui transforme la base de la représentation F. Les éléments de la matrice M sont déterminés à l'aide de la relation ci-dessus car on connaît les éléments de matrice de F et les éléments des matrices irréductibles.

Représentation régulière F^r. C'est la représentation de degré N obtenue en prenant pour base de la représentation les N éléments du groupe. Chaque ligne, chaque colonne de la matrice à N dimensions représentant S dans F^r a tous ses éléments nuls à l'exception de l'un d'entre eux qui est égal à 1.

En réduisant la représentation régulière, on trouve que chaque représentation irréductible du groupe est contenue un nombre de fois égal à la dimension de la représentation

$$F^r \simeq \sum_{j=1}^{L} l_j F^j \qquad (14)$$

II - 5 - FONCTIONS PROPRES D'UN OPERATEUR INVARIANT.

Théorème de WIGNER.

La permutation des variables dans une fonction ou dans un opérateur différentiel suivant les permutations R, S ... du groupe symétrique peut être représentée par les opérateurs P_R, P_S ... (Si R est la transposition (kl), P_R est noté P_{kl}).

Considérons l'équation aux valeurs propres

$$H \psi^j = E^j \psi^j \qquad (15)$$

ou l'opérateur H est invariant quand on permute les variables : $P_R H = H P_R$. La fonction $P_R \psi^j$ est également fonction propre de l'opérateur H associée à la valeur propre E^i.

Si E^i est m fois dégénérée il existe m fonctions propres linéairement indépendantes $\psi^j_1 \ldots \psi^j_m$ et orthogonales, associées à E^j. Toute fonction propres $P_R \psi^j_k$ est une combinaison linéaire des ψ^j_l

$$P_R \psi^j_k = \sum_{l=1}^{m} a^j_{lk}(R)\, \psi^j_l \qquad (16)$$

La matrice $a^j(R)$ forme une représentation de dimension m du groupe.

S'il n'y a pas de dégénérescence accidentelle, c'est-à-dire une dégénérescence produite par des conditions initiales particulières imposées au problème, l'ensemble des fonctions ψ^j_l forme une base d'une représentation irréductible du groupe. En effet toute fonction propre associée à la valeur propre E^j est une combinaison linéaire de toutes les fonctions ψ^j_k et il n'existe pas de sous-espace invariant de l'espace à m dimensions défini par la base des ψ^j_k

$$P_R \psi^i_k = \sum_{l=1}^{l_j} F^j_{lk}(R) \quad \psi^j_l \qquad (17)$$

Les fonctions propres ψ^j_l appartiennent à la lième ligne de la représentation F^j et ses partenaires sont $\psi^j_1 \ldots \psi^j_{l_j}$; l_j est la dimension de la représentation F^j.

Nous pouvons maintenant énoncer le théorème de WIGNER.

Théorème de WIGNER : A chaque valeur propre d'un opérateur invariant par rapport au groupe des permutations est attachée une représentation irréductible de ce groupe. La fonction ψ^j_k correspond à la kième ligne de la représentation $F(j)$.

Les partenaires de cette fonction sont $\psi^j_1 \ldots \psi^j_{l_j}$

Orthogonalité des fonctions. Deux fonctions ψ^j_k et $\phi^{j'}_{k'}$ qui appartiennent à des représentations irréductibles différentes ou à différentes lignes de la même représentation sont orthogonales. En effet

$$P_R \psi^j_k = \sum_l F^j_{lk}(R) \quad \psi^j_l \qquad P_R \phi^{j'}_{k'} = \sum_{l'} F^{j'}_{l'k'}(R) \quad \phi^{j'}_{l'} \qquad (18)$$

Les opérateurs P_R sont unitaires ; le produit scalaire $(\psi^j_k , \phi^{j'}_{k'})$ a pour valeur

$$(\psi^j_k , \phi^{j'}_{k'}) = \sum_l \sum_{l'} F^{j\,*}_{lk}(R) \quad F^{j'}_{l'k'}(R) \quad (\psi^j_l , \phi^{j'}_{l'}) \qquad (19)$$

soit aussi en utilisant les propriétés des éléments de matrices F^j_{lk}

$$(\psi^j_k , \phi^{j'}_{k'}) = \frac{N}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{kk'} \sum_l (\psi^j_l , \phi^{j'}_{l'}) \qquad (20)$$

soit

$$(\psi^j_k , \phi^{j'}_{k'}) = 0 \quad \text{pour} \quad j \neq j' \quad \text{et} \quad k \neq k' \qquad (21)$$

De plus le produit scalaire (ψ^j_k , ϕ^j_k) est indépendant de k et de k' ; il est

donc le même pour toutes les fonctions partenaires.

II - 6 - SYMETRIE DES FONCTIONS.

Nous allons définir les symétries des fonctions que se transforment suivant les représentations irréductibles des opérateurs de transposition P_{ij} ($j > i$)

La représentation irréductible $F^{[n]}$ liée à la partition $[n]$ est à une dimension. Les éléments de matrice sont + 1. Donc

$$P_{ij}\, \psi\, [n] = \psi\, [n] \qquad (22)$$

Nous disons que la fonction $\psi\, [n]$ est entièrement symétrique.

La représentation irréductible $F^{[1^n]}$ liée à la partition $[1^n]$ est également à une dimension. Les éléments des matrices des transpositions sont -1.

$$P_{ij}\, \psi\, [1^n] = -\psi [1^n] \qquad (23)$$

Nous disons que la fonction $\psi\, [1^n]$ est entièrement antisymétrique.

A la partition $[\lambda]$ nous faisons correspondre la représentation irréductible $F^{[\lambda]}$. Les l_λ fonctions associées à $F^{[\lambda]}$ seront notées $\psi\, [[\lambda], \nu]$ avec $1 \leqslant \nu \leqslant l_\lambda$ Elles se transforment entre elles suivant les relations

$$P_{ij}\, \psi\, ([\lambda], \nu) = \sum_{\mu=1}^{l_\lambda} F^{[\lambda]}_{\mu\nu}(ij)\ \psi\, ([\lambda], \mu)$$

La fonction $\psi\, ([\lambda], \mu)$ appartient à la μ ième ligne de la représentation $F^{[\lambda]}$. Nous disons que ces fonctions possèdent la symétrie intermédiaire $[\lambda]$.

En utilisant une propriété des matrices des transpositions nous pouvons mettre la relation ci-dessous sous une forme plus intéressante. En construisant les matrices F^{λ} (k-1,k) nous avons vu que

$$F^{\lambda}_{\mu\nu}(k-1,k) = F^{\lambda}_{\nu\mu}(k-1,k)$$

donc

$$P_{k-1,k}\, \psi([\lambda], \nu) = \sum_{\mu} F^{\lambda}_{\nu\mu}(k-1,k)\ \psi\, ([\lambda], \mu)$$

La relation ci-dessus s'écrit aussi sous la forme matricielle

$$P_{k-1,k} \left(\psi\ [\lambda] \right) = \left(F^{\lambda}(k-1,k)\right) \left(\psi\ [\lambda] \right) \qquad (24)$$

où $\left\{ \psi \left[\lambda\right] \right\}$ désigne une matrice colonne à l_λ dimensions.

Pour illustrer notre définition appliquons les conclusions ci-dessus à S_3.

Les fonctions entièrement symétriques sont telles que

$$P_{ij}\, \psi\left[3\right] = \psi\left[3\right] \tag{25}$$

Les fonctions entièrement antisymétriques sont telles que

$$P_{ij}\, \psi\left[1^3\right] = -\,\psi\left[1^3\right] \tag{26}$$

Les fonctions de symétrie intermédiaire se transforment entre elles sous l'action des opérateurs de permutation suivant les relations matricielles

$$P_{12} \begin{Bmatrix} \psi\left[21\right]1 \\ \psi\left[21\right]2 \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \psi\left[21\right]1 \\ \psi\left[21\right]2 \end{Bmatrix}$$

$$P_{23} \begin{Bmatrix} \psi\left[21\right]1 \\ \psi\left[21\right]2 \end{Bmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} \psi\left[21\right]1 \\ \psi\left[21\right]2 \end{Bmatrix} \tag{27}$$

II - 7 - REDUCTION DE LA REPRESENTATION REGULIERE

Notre but est de former des opérateurs de base de la représentation régulière à l'aide desquels nous pourrons construire une base de la représentation naturelle à partir d'une fonction quelconque.

Opérateurs de base de la représentation régulière. Nous introduisons les N opérateurs suivants

$$e^{j}_{\mu\nu} = \frac{l_j}{N} \sum_{S} F^{j\,*}_{\mu\nu}(S)\, P_S \qquad j=1, \ldots L. \quad \mu, \nu = 1, 2, \ldots l_j \tag{28}$$

où la sommation est étendue à tous les éléments du groupe.

En utilisant les propriétés des éléments de matrices des représentations irréductibles.

$$P_S = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\mu\nu=1}^{l_j} F^{j}_{\mu\nu}(S)\; e^{j}_{\mu\nu} \tag{29}$$

Les opérateurs $e^{j}_{\mu\nu}$ possèdent les propriétés suivantes

$$e^{j}_{\mu\nu}\; e^{k}_{\alpha\beta} = \delta_{jk}\, \delta_{\nu\alpha}\, e^{j}_{\mu\beta} \tag{30}$$

d'où l'on déduit la relation

$$P_S e^{j}_{\alpha\beta} = \sum_{\mu=1}^{l_j} F^{j}_{\mu\alpha}(S)\, e^{j}_{\mu\beta} \qquad (31)$$

Nous voyons que les N opérateurs $e^{j}_{\mu\nu}$ forment une base d'opérateurs de la représentation régulière qui est ainsi automatiquement réduite. Les l_j opérateurs avec la même valeur de ν ($\mu = 1, \ldots l_j$) forment une base de la représentation F^j et possèdent la symétrie attachée à la partition $[\,j\,]$. Le Le nombre d'opérateurs se transformant suivant les matrices de F^j sous l'action des opérateurs de permutation est égal à l_j^2. C'est une propriété de la représentation régulière lorsqu'elle a été réduite.

Pour le groupe S_3, en explicitant les valeurs $F^{j}_{\mu\nu}(S)$ nous obtenons six opérateurs 0. Nous les avons écrits en fonction des opérateurs de transposition

$$e^{[3]}_{11} = 0_{[3]} = \frac{1}{6}(1 + P_{12} + P_{23})(1 + P_{13})$$

$$e^{[1^3]}_{11} = 0_{[1^3]} = \frac{1}{6}(1 - P_{12} - P_{23})(1 - P_{13})$$

$$e^{[21]}_{11} = 0_{1[21]1} = \frac{1}{3}(-P_{12} + \frac{1}{2}P_{13} + \frac{1}{2}P_{23})(1 + P_{12})P_{13}$$

$$e^{[21]}_{21} = 0_{1[21]2} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(P_{13} - P_{23})(1 + P_{12})P_{13} \qquad (32)$$

$$e^{[21]}_{12} = 0_{2[21]1} = \frac{1}{2\sqrt{3}}(P_{13} - P_{23})(1 - P_{12})P_{13}$$

$$e^{[21]}_{22} = 0_{2[21]2} = \frac{1}{3}(P_{12} - \frac{1}{2}P_{13} - \frac{1}{2}P_{23})(1 - P_{12})P_{13}$$

Formation d'une base de la représentation régulière. En partant d'une fonction quelconque f de n variables on peut, en général, former N fonctions $P_S f$ en permutant les n variables à l'aide des opérateurs P_S. On forme ainsi une base de la représentation régulière. Les matrices des permutations de ces N fonctions sont réductibles. Pour réduire cette représentation nous pouvons utiliser les opérateurs définis au paragraphe précédent.

Posons en effet

$$f^{j}_{\mu\nu} = e^{j}_{\mu\nu} f = \frac{l_j}{N} \sum_{S} F^{j*}_{\mu\nu}(S)\, P_S f \qquad (33)$$

Les fonctions $f^{j}_{\mu\nu}$ sont des combinaisons linéaires des fonctions $P_S f$ et elles se transforment, sous l'action des opérateurs de permutation suivant les relations

$$P_S f^{j}_{\mu\nu} = \sum_{\alpha=1}^{l_j} F^{j}_{\alpha\nu}(S) \; f^{j}_{\alpha\nu} \qquad (34)$$

Ainsi - les N fonctions $f^{j}_{\mu\nu}$ sous-tendent la totalité de l'espace de base de la représentation régulière

- les l_j fonctions correspondant à la même valeur de ν possèdent la symétrie attachée à F^j

Le raisonnement ci-dessus est valable quand la fonction f permet de construire N fonctions $P_S f$ indépendantes. Si le nombre obtenu est plus restreint cela signifie que la fonction f possède "une certaine symétrie". Il faut alors envisager chaque cas en particulier.

Nous donnons quelques exemples ci-dessous, dans le cas de S_3. L'action des opérateurs non cités donne zéro.

(35)

$$0[3]\, f[3] = f[3] \qquad 0[1^3]\, f[1^3] = f[1^3]$$

$$0_1[21]1 \cdot f[21]1 = \frac{1}{2} f[21]1 \qquad 0_1[21]1\, f[21]2 = \frac{\sqrt{3}}{2} f[21]1$$

$$0_1[21]2 \cdot f[21]1 = \frac{1}{2} f[21]2 \qquad 0_1[21]2\, f[21]2 = \frac{\sqrt{3}}{2} f[21]2$$

$$0_2[21]1 \cdot f[21]1 = \frac{\sqrt{3}}{2} f[21]1 \qquad 0_2[21]1\, f[21]2 = \frac{-1}{2} f[21]1$$

$$0_2[21]2 \cdot f[21]1 = \frac{\sqrt{3}}{2} f[21]2 \qquad 0_2[21]2\, f[21]2 = \frac{-1}{2} f[21]2$$

Développement d'une fonction de symétrie quelconque. Avec la fonction f du paragraphe précédent nous pouvons écrire

$$P_S f = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\mu\nu=1}^{l_j} F^{j}_{\mu\nu}(S) \; f^{j}_{\mu\nu} \qquad (36)$$

En prenant pour P_S l'opérateur unité, les éléments de matrices des représentations de cet opérateur sont simples $F^{j}_{\mu\nu}(E) = \delta_{\mu\nu}$

Donc $$f = \sum_{j=1}^{L} \sum_{\mu=1}^{l_j} f^{j}_{\mu\mu} \qquad (37)$$

Une fonction quelconque peut se développer suivant les fonctions des diverses symétries.

II - 8 - PRODUIT TENSORIEL DE DEUX REPRESENTATIONS.

Définition du produit tensoriel de deux matrices. Le produit tensoriel de la matrice carrée à n dimensions F dont les éléments sont F_{ij} et la matrice carrée G à m dimensions est une nouvelle matrice carrée à m. n dimensions notée F ⊗ G qui est construite de la manière suivante

$$F \otimes G = \begin{pmatrix} F_{11} G & F_{12} G \ldots \\ F_{21} G & F_{22} G \ldots \\ \ldots & \end{pmatrix} \qquad (38)$$

Le caractère de la nouvelle matrice est égal au produit des caractères de F et de G

$$\chi^{FG} = \chi^{F} \quad \chi^{G} \qquad (39)$$

Dénombrement des composantes irréductibles du produit tensoriel de deux représentations. Le produit tensoriel de deux représentations irréductibles ne donne pas une représentation irréductible, mais elle peut être réduite.

Nous écrirons

$$F^{g} \otimes F^{h} \simeq \sum_{j=1}^{L} n_{j}^{gh} F^{j} \qquad (40)$$

Le propriétés des caractères nous permettent d'écrire pour la classe C_a

$$\chi^{g}(a)\, \chi^{h}(a) = \sum_{j=1}^{L} n_{j}^{gh}\, \chi^{j}(a)$$

et aussi

$$n_{j}^{gh} = \frac{1}{N} \sum_{a=1}^{L} h_a\, \chi^{g}(a)\, \chi^{h}(a)\, \chi^{j*}(a) \qquad (41)$$

Les caractères de S_n étant réels nous voyons que $F^g \otimes F^h$ et $F^h \otimes F^g$ ont une décomposition analogue.

Nous donnons en appendice les décompositions des produits tensoriels pouvant intervenir dans S_3 et S_4.

Produit tensoriel de deux représentations irréductibles. Les bases des deux représentations irréductibles $[\mu]$ et $[\nu]$ dont nous faisons le produit sont les fonctions f^{μ}_{m} et f^{ν}_{n} $(1 \leqslant m \leqslant l_\mu$ et $1 \leqslant n \leqslant l_\nu)$.

La base du produit tensoriel sera constituée par les $l_\mu \, l_\nu$ fonctions $f^{\mu}_{m} \, f^{\nu}_{n}$.

En partant des fonctions $f^{\mu}_{m} \, f^{\nu}_{n}$ nous formons des fonctions appartenant à la symétrie $[\lambda]$ en appliquant à ces fonctions les opérateurs $e^{\lambda}_{\sigma\tau}$

$$h^{\lambda}_{l} = e^{\lambda}_{\sigma\tau} \quad f^{\mu}_{m} \, f^{\nu}_{n} \tag{42}$$

soit en explicitant l'action des opérateurs P_S sur f^{μ}_{m} et f^{ν}_{n}

$$h^{\lambda}_{l} = \frac{l_\lambda}{N} \sum_{S} \sum_{m'=1}^{l_\mu} \sum_{n'=1}^{l_\nu} F^{\lambda}_{\sigma\tau} * (S) \, F^{\mu}_{m'm}(S) \, F^{\nu}_{n'n}(S) \, f^{\mu}_{m'} f^{\nu}_{n'} \tag{43}$$

La fonction h_l est telle que

$$P_R \, h^{\lambda}_{l} = \sum_{r} F^{\lambda}_{rl} \, (R) \quad h^{\lambda}_{r}$$

Nous pouvons construire les fonctions h à partir des éléments des matrices irréductibles.

Par exemple, pour S_3 la réduction du produit $[21] \otimes [21]$ nous donne

$$\begin{aligned}
h[3] &= f[21]1 \; g[21]1 + f[21]2 \; g[21]2 \\
h[1^3] &= f[21]1 \; g[21]2 - f[21]2 \; g[21]1 \\
h[21]1 &= f[21]2 \; g[21]2 - f[21]1 \; g[21]1 \\
h[21]2 &= f[21]1 \; g[21]2 + f[21]2 \; g[21]1
\end{aligned} \tag{44}$$

II - 9 - FONCTIONS DE SPIN-CHARGE DE 3 ET 4 NUCLEONS.

Nous allons déterminer les symétries des fonctions de spin-charge de 3 et 4 nucléons en partant d'un théorème qui donne les symétries des fonctions de spin de N fermions.

Symétrie des fonctions de spin. Les fonctions de spin total (S, S_Z) formées par

n fermions identiques de spin $\frac{1}{2}$ sont associées à une représentation irréductible de S_n dont le diagramme de YOUNG correspond à la partition $\left[\frac{1}{2}n + S,\ \frac{1}{2}n - S\right]$ de l'entier n

Si n = 3, les fonctions de l'état doublet $S = \frac{1}{2}$ correspondent à la partition $[21]$

les fonctions de l'état quadruplet $S = \frac{3}{2}$ correspondent à la partition $[3]$

Si n = 4, Etat singulet S = 0 Partition $[22]$

Etat triplet S = 1 Partition $[31]$

Etat quintuplet S = 2 Partition $[4]$

Fonctions de spin-charge du triton. Les fonctions de charge du spin isobarique du triton appartiennent à l'état doublet de charge. Le nombre de charge est $T = \frac{1}{2}$ et $T_3 = -\frac{1}{2}$

Les fonctions de spin-charge sont les produits tensoriels des fonctions de spin et des fonctions de spin isobarique. Les résultats sont les suivants :
Etat quadruplet de spin : les fonctions de spin-charge appartiennent à la symétrie $[21]$. Nous les noterons

$$\xi\ ([21]\ \nu\ ;\ \tfrac{3}{2}\ S_z) \qquad S_z = \tfrac{3}{2},\ \tfrac{1}{2},\ -\tfrac{1}{2},\ -\tfrac{3}{2} \qquad (45)$$

Etat doublet de spin

$$\xi\ ([3]\ ;\ \tfrac{1}{2}\ S_z)$$

$$\xi\ ([1^3]\ ;\ \tfrac{1}{2}\ S_z) \qquad S_z = \tfrac{1}{2},\ -\tfrac{1}{2} \qquad \nu = 1,2 \qquad (46)$$

$$\xi\ ([21]\ \nu\ \tfrac{1}{2}\ S_z)$$

Fonctions de spin-charge de la particule α; Les fonctions de spin isobarique appartiennent à l'état singulet de charge $T = 0$ $T_3 = 0$. Les fonctions de spin-charge sont les suivantes :

Etat quintuplet de spin

$$\xi\ ([22]\ \nu,\ 2\ S_z) \qquad \nu = 1,2 \qquad S_z = 2,\ 1,\ 0,\ -1,\ -2 \qquad (47)$$

Etat triplet de spin

$$\xi\ ([31]\ \nu,\ 1\ S_z) \qquad \nu = 1,\ 2,\ 3 \qquad S_z = 1,\ 0,\ -1 \qquad (48)$$

$$\xi\ ([21^2]\ \nu,\ 1\ S_z)$$

Etat singulet de spin

$$\xi\ (\,[4\,],\ 00\,)$$

$$\xi\ (\,[1^4],\ 00\,)$$

$$\xi\ (\,[22]_\nu,\ 00\,) \qquad \nu = 1,2 \qquad (49)$$

CHAPITRE III

CLASSIFICATION DES FONCTIONS D'ONDE DU TRITON ET DE LA PARTICULE α

Dans ce chapitre nous proposons une nouvelle méthode pour classer les fonctions d'onde du triton et de la particule α. Nous utiliserons les résultats du chapitre précédent relatifs au produit de deux représentations. Nous partons des fonctions de spin-charge de trois et quatre nucléons dont nous connaissons les symétries. Nous formons ensuite les fonctions des variables d'espace des divers états et à la fin nous les multiplions par les fonctions de spin-charge.

Notre méthode diffère de la méthode que BLATT et DERRICK ont employée pour le triton par la manière de former les états P et D : nous ne faisons pas intervenir les angles d'Euler pour orienter le triangle formé par les particules. Notre méthode est également différente de celle qu'emploie COHEN pour classer les fonctions d'onde de la particule α. Celui-ci forme des opérateurs avec les variables d'espace et les opérateurs de spin et les fait agir sur une fonction où figurent les variables de spin et les variables de spin isobarique.

Dans le premier paragraphe nous décrivons la méthode de construction des fonctions des variables d'espace des états S, P et D. Dans le deuxième et dans le troisième, nous comptons les différentes fonctions qui sont nécessaires pour former les fonctions d'onde antisymétriques du triton et de la particule α.

III - 1 - PRINCIPE DE CONSTRUCTION DES FONCTIONS DES VARIABLES D'ESPACE.

Par rapport à un système d'axes quelconques les nucléons sont repérés par les vecteurs $\vec{r}_i$

Les vecteurs $\vec{r}_i$ se transforment entre eux quand on permute les nucléons. Ils forment la base d'une représentation matricielle du groupe symétrique. En réduisant la représentation on obtient une nouvelle base qui s'exprime par des

combinaisons linéaires des vecteurs $\vec{r}_i$ et qui constituent de nouvelles variables pour repérer les nucléons. Nous donnons les résultats obtenus pour le triton et la particule α.

Nous prenons comme nouvelles variables d'espace du triton les trois vecteurs suivants :

$$\vec{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \qquad \vec{\rho} = \sqrt{\frac{2}{3}} \left[-\vec{r}_3 + \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \right] \quad (1)$$

$$\vec{R} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3)$$

Le vecteur $\vec{R}$ est entièrement symétrique, tandis que les vecteurs $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$ se transforment entre eux, sous l'action des opérateurs de permutation suivant les relations matricielles de la symétrie intermédiaire.

$$P_{12} \begin{pmatrix} \vec{\rho} \\ \vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho} \\ \vec{r} \end{pmatrix} \qquad P_{23} \begin{pmatrix} \vec{\rho} \\ \vec{r} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{\rho} \\ \vec{r} \end{pmatrix} \quad (2)$$

Si nous fixons le centre de gravité à l'origine des axes : $\vec{R} = 0$, alors les six variables d'espace sont réparties entre les vecteurs $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$

Pour repérer les nucléons de la particule α nous prenons les vecteurs suivants

$$\vec{r} = \frac{\sqrt{3}}{2} \left[-\vec{r}_4 + \frac{1}{3} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3) \right] \qquad \vec{\rho}_1 = \sqrt{\frac{2}{3}} \left[-\vec{r}_3 + \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2) \right] \quad (3)$$

$$\vec{R} = \frac{1}{2} (\vec{r}_1 + \vec{r}_2 + \vec{r}_3 + \vec{r}_4) \qquad \vec{\rho}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$$

Le vecteur R est entièrement symétrique, tandis que les vecteurs $\vec{r}$, $\vec{\rho}_1$ et $\vec{\rho}_2$ se transforment entre eux sous l'action des opérateurs de permutation, suivant les relations matricielles de la symétrie de type $[31]$.

$$P_{12} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{\rho}_1 \\ \vec{\rho}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{r} \\ \vec{\rho}_1 \\ \vec{\rho}_2 \end{pmatrix}$$

$$P_{23}\begin{pmatrix}\vec{r}\\ \vec{\rho}_1\\ \vec{\rho}_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -\frac{1}{2} & +\frac{\sqrt{3}}{2}\\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{r}\\ \vec{\rho}_1\\ \vec{\rho}_2\end{pmatrix} \qquad (4)$$

$$P_{34}\begin{pmatrix}\vec{r}\\ \vec{\rho}_1\\ \vec{\rho}_2\end{pmatrix} \begin{pmatrix}-\frac{1}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0\\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & \frac{1}{3} & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{r}\\ \vec{\rho}_1\\ \vec{\rho}_2\end{pmatrix} \qquad (4)$$

En faisant $\vec{R} = 0$ les neuf variables d'espace sont réparties entre $\vec{r}$, $\vec{\rho}_1$ et $\vec{\rho}_2$.

Les modules des vecteurs $\vec{r}_i - \vec{r}_j$ que nous appelons r_{ij} sont invariants pour une rotation des axes de coordonnées. Ils s'expriment en fonction des vecteurs $\vec{r}$ et $\vec{\rho}_j$; ils ne constituent pas un nouveau système de variables mais ils sont commodes pour former les fonctions de l'état S et en général des fonctions invariantes par rotation. Nous les nommerons par la suite : variables radiales.

Pour former les fonctions des états P et D nous utiliserons les résultats connus sur les opérateurs tensoriels. Une étude de ces résultats est donnée par EDMONDS [305].

En partant des coordonnées V_x, V_y, V_z d'un vecteur $\vec{V}$ nous pouvons former un opérateur tensoriel irréductible d'ordre un dont les composantes sont

$$T(1, \pm 1) = V_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (V_x \pm i V_y) \qquad T(1,0) = V_o = V_z \qquad (5)$$

Mais un tel opérateur est impair. En partant de deux vecteurs $\vec{U}$ et $\vec{V}$, EDMONDS [305] donne un opérateur tensoriel irréductible d'ordre un, de parité paire dont les composantes sont

$$T(1,m) = -\frac{i}{\sqrt{2}} (\vec{U} \wedge \vec{V})_m \qquad (m = 0, \pm 1) \qquad (6)$$

A partir de deux opérateurs tensoriels $T_1(l_1 m)$ et $T_2(l_2 m_2)$ nous pouvons former un opérateur tensoriel $T(l\,m)$.

$$T(l\,m) = \sum_{m_1 m_2} T_1(l_1 m_1)\, T_2(l_2 m_2)\, (l_1 m_1 l_2 m_2 \mid l_1 l_2 l m) \qquad (7)$$

où $(l_1\ m_1\ l_2\ m_2 \mid l_1\ l_2\ l\ m)$ est un coefficient de CLEBSCH - GORDAN. En particulier pour former un opérateur tensoriel de l'état D nous pouvons partir de $T_1\ (1,\ m_1)$ et de $T_2\ (1,\ m_2)$.
Les diverses composantes de cet opérateur tensoriel sont :

$$T\ (2,\ \overset{+}{-}\ 2) = T_1\ (1,\ \overset{+}{-}\ 1)\ .\ T_2\ (1,\ \overset{+}{-}\ 1)$$

$$T\ (2,\ \overset{+}{-}\ 1) = \frac{1}{\sqrt{2}}\ \left[T_1\ (1,0)\ T_2(1,\ \overset{+}{-}\ 1) + T_1(1,\overset{+}{-}\ 1)\ T_2(1,0)\right] \quad (8)$$

$$T\ (2,\ 0) = \frac{1}{\sqrt{6}}\ \left(T_1(1,1)\ T_2(1,-1) + 2T_1\ (1,0)\ T_2\ (1,0) + T_1\ (1,-1)\ T_2\ (1,1)\right)$$

Les différentes composantes de ces opérateurs tensoriels se transforment entre elles de la même manière que les fonctions sphériques. Nous pourrons donc encore les construire en utilisant les fonctions sphériques des vecteurs que nous employons dans le problème.
Nous multiplions ensuite ces fonctions par des fonctions de spin pour former des fonctions de l'opérateur $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$.

Lorsque le nombre de composantes de l'opérateur tensoriel est égal au nombre de composantes des fonctions de spin, comme dans le cas de la particule α, le groupement se réduit à un produit scalaire d'opérateurs tensoriels.

$$(\vec{T}^{(j)}\ .\ \vec{S}^{(j)}) = \sum_m\ (-1)^m\ T(j,m)\ S(j,-m) \qquad (9)$$

Dans la suite, pour simplifier l'écriture nous grouperons les composantes $T(j,m)$ dans la notation vectorielle $\vec{T}^{(j)}$.

III - 2 - FORMATION DES FONCTIONS DES DIFFERENTS ETATS DU TRITON.

Nous nous proposons de former une fonction d'onde antisymétrique dans le cas ou les forces nucléaires comportent des termes tensoriels et des termes de couplage spin-orbite. La parité paire p et les nombres de spin isobarique $T = \frac{1}{2}$ et $T_3 = -\frac{1}{2}$ sont de bons nombres quantiques. L et S ne sont pas de bons nombres quantiques mais $J = \frac{1}{2}$ et J_z le sont. L'état fondamental est alors formé par le mélange des états spectroscopiques.

$$^{22}S_{\frac{1}{2}} \qquad ^{22}P_{\frac{1}{2}} \qquad ^{24}P_{\frac{1}{2}} \qquad ^{24}D_{\frac{1}{2}}$$

Les fonctions de ces divers états sont obtenues en combinant les produits des fonctions d'espace et des fonctions de spin-charge.

Les symétries des fonctions de spin-charge dépendent de la valeur de 2S + 1. Pour les états doublets les trois sortes de symétries des permutations de trois objets interviennent, tandis que pour les états quadruplets seule la symétrie intermédiaire intervient.

Dans le cas des états doublets nous formerons une fonction d'onde antisymétrique produit des variables d'espace et de spin-charge en partant de la relation.

$$^2\psi\left[1^3\right] = \xi\left[1^3\right] F\left[3\right] - \xi\left[3\right] F\left[1^3\right] \qquad (10)$$

$$+ \xi\left[21\right] 2\, F\left[21\right] 1 - \xi\left[21\right] 1\, F\left[21\right] 2$$

Les fonctions ξ sont les fonctions de spin-charge données en appendice et les F sont les fonctions des variables d'espace. Pour former $\psi\left[1^3\right]$ nous avons ajouté les diverses formes antisymétriques qui apparaissent dans le produit de deux espaces.

Pour les états quadruplets nous formerons une fonction d'onde antisymétrique en prenant une fonction de la forme

$$^4\psi\left[1^3\right] = \xi\left[21\right] 2\, G\left[21\right] 1 - \xi\left[21\right] 1\, G\left[21\right] 2$$

(11)

Les fonctions G sont des fonctions des variables d'espace.

Aucune autre symétrie n'intervient car les fonctions de spin-charge des états quadruplets ne possèdent que la symétrie intermédiaire.

Les trois vecteurs $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{R}$ choisis pour repérer les nucléons du triton sont indépendants. Leurs domaines de variation sont disjoints et la longueur de chaque vecteur peut varier de zéro à l'infini. Chaque vecteur $\vec{r}_i$ s'exprime linéairement en fonction des $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{R}$.

$$\vec{r}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{R} + \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{r} + \frac{1}{\sqrt{6}}\vec{\rho} \qquad \vec{r}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{R} - \frac{1}{\sqrt{2}}\vec{r} + \frac{1}{\sqrt{6}}\vec{\rho}$$

$$\vec{r}_3 = \frac{1}{\sqrt{3}}\vec{R} - \sqrt{\frac{2}{3}}\vec{\rho} \qquad (12)$$

Dans ce qui suit nous fixons le centre de gravité à l'origine : $\vec{R} = 0$

Alors l'opérateur de LAPLACE du système se décompose simplement

$$\Delta = \Delta_r + \Delta_\rho$$

Il en est de même pour l'opérateur moment angulaire

$$\vec{L} = \vec{L}_r + \vec{L}_\rho$$

Le passage des $\vec{r}_i$ aux trois vecteurs $\vec{r}$, $\vec{\rho}$ et $\vec{R}$ se faisant d'une manière linéaire, le nouvel élément de volume s'écrit

$$dV = r^2 dr \sin\Theta_r \, d\Theta_r \, d\varphi_r \cdot \rho^2 d\rho \sin\Theta_\rho \, d\Theta_\rho \, d\varphi_\rho \qquad (13)$$

Formons maintenant la fonction d'onde de l'état doublet ^2S. Il existe une fonction de spin-charge de chaque symétrie pour cet état. Dans la suite nous désignerons les fonctions de spin-charge par

$$\xi\left(\left[\lambda\right] ; S, S_z\right)$$

$\left[\lambda\right]$ désigne la symétrie à laquelle appartient la fonction ; S et S_z désignent les nombres quantiques de spin. Il est inutile d'expliciter les nombres quantiques de spin isobarique car ces nombres sont fixes pour un noyau donné.

La fonction antisymétrique de l'état doublet

$$^2\psi\left(\left[1^3\right], L, J\ J_z\right)$$

appartient aux états ^2S et ^2P avec les nombres quantiques J et J_z. La fonction d'onde de l'état ^2S sera de la forme

$$^2\psi\left(\left[1^3\right], 0\ \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right) = R_1\left[3\right]\xi\left(\left[1^3\right]; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right) + R_2\left[1^3\right]\xi\left(\left[3\right]; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right) \qquad (14)$$

$$+ R_3\left[21\right]1\ \xi\left(\left[21\right]2; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right) - R_3\left[21\right]2\xi\left(\left[21\right]1; \frac{1}{2}\ \frac{1}{2}\right)$$

Les fonctions R_i sont des fonctions des variables radiales.

$R_3\left[21\right]1$ et $R_3\left[21\right]2$ sont partenaires et possèdent la symétrie intermédiaire.

Le point de départ de la construction des fonctions des variables d'espace de l'état P est l'opérateur tensoriel pair et antisymétrique

$$T\left(\left[1^3\right] \; ; \; 1, \; m\right) = -\frac{i}{\sqrt{2}} \left(\vec{r} \wedge \vec{p}\right) m \qquad (15)$$

En multipliant par des fonctions R i des variables radiales nous obtenons des opérateurs des diverses symétries que nous désignons par T'

$$\begin{aligned}
T'_4 \left(\left[3\right] \; ; \; 1\, m\right) &= T \,.\, R_4 \left[1^3\right] \\
T'_5 \left(\left[1^3\right] \; ; \; 1\, m\right) &= T \,.\, R_5 \left[3\right] \\
T'_6 \left(\left[21\right] 1 \; ; \; 1\, m\right) &= T \,.\, R_6 \left[21\right] 2 \\
T'_6 \left(\left[21\right] 2 \; ; \; 1\, m\right) &= -\, T \,.\, R_6 \left[21\right] 1
\end{aligned} \qquad (16)$$

En combinant à l'aide de coefficients de CLEBSCH-GORDAN ces opérateurs avec les fonctions de spin-charge de l'état doublet nous formons les fonctions de l'état ^2P. Pour simplifier les notations dans ce chapitre, une sommation sur les coefficients de CLEBSCH-GORDAN sera notée :

$$S\, T'\, \xi$$

La fonction d'onde de l'état ^2P s'écrira en tenant compte du produit des symétries (nous omettons les nombres J et J_z dans l'expression de ψ)

$$\begin{aligned}
{}^2\psi\left(\left[1^3\right], 1\right) = {} & S\, T'_4 \left[3\right] \xi\left[1^3\right] + S\, T'_5 \left[1^3\right] \xi\left[3\right] \\
& + S\, T'_6 \left[21\right] 1 \; \xi\left[21\right] 2 - S\, T'_6 \left[21\right] 2 \; \xi\left[21\right] 1
\end{aligned} \qquad (17)$$

Les fonctions de spin de l'état quadruplet ne possèdent que la symétrie intermédiaire. Les fonctions des variables d'espace à introduire sont

$$\begin{aligned}
T'_7 \left(\left[21\right] 1, 1\, m\right) &= T \,.\, R_7 \left[21\right] 2 \\
T'_7 \left(\left[21\right] 2, 1\, m\right) &= -\, T \,.\, R_7 \left[21\right] 1
\end{aligned} \qquad (18)$$

La fonction d'onde de l'état ^4P s'écrira

$${}^4\psi\left(\left[1^3\right], 1\right) = S\, T'_7 \left[21\right] 1 \; \xi\left[21\right] 2 - S\, T'_7 \left[21\right] 2 \; \xi\left[21\right] 1$$

A partir des opérateurs tensoriels r_m et ρ_m nous pouvons former les opérateurs tensoriels de parité paire et de la forme T (2, m) : T_{r2}, $T_{\rho 2}$, $T_{r\rho}$ dont les composantes sont données par les relations suivantes :

$$
\begin{aligned}
T_{r2}\ (2, \pm 2) &= r^2_{\pm 1} \\
T_{r^2}\ (2, \pm 1) &= \sqrt{2}\, r_{\pm 1}\, r_o \\
T_{r^2}\ (2, 0) &= \sqrt{\frac{2}{3}}\, (r_1\, r_{-1} + r_o^2) \\
T_{r\rho}\ (2, \pm 2) &= r_{\pm 1} \cdot \rho_{\pm 1} \\
T_{r\rho}\ (2, \pm 1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\, (r_o\, \rho_{\pm 1} + r_{\pm 1}\, \rho_o) \\
T_{r\rho}\ (2, 0) &= \frac{1}{\sqrt{6}}\, (r_1\, \rho_{-1} + r_{-1}\, \rho_1 + 2\, r_o\, \rho_o)
\end{aligned}
\qquad (19)
$$

Les composantes r_m et ρ_m se transforment, sous l'action des opérateurs de permutation comme les vecteurs $\vec{r}$ et $\vec{\rho}$. Par conséquent les opérateurs tensoriels T_{r^2}, T_{ρ^2} et $T_{r\rho}$ se transforment comme r^2, ρ^2 et $\vec{r}\,\vec{\rho}$. Nous pouvons ainsi former les combinaisons des diverses symétries.

$$
\begin{aligned}
T[3] &= T_{r^2} + T_{\rho^2} \\
T[21]\ 1 &= \frac{1}{2}\, (T_{r^2} - T_{\rho^2}) \\
T[21]\ 2 &= T_{r\rho}
\end{aligned}
\qquad (20)
$$

En partant de ces opérateurs tensoriels nous pouvons en former d'autres en les multipliant par des fonctions des variables radiales

$$
\begin{aligned}
T'_8\ [21]\ 1 &= T\ [3]\ R_8\ [21]\ 1 \\
T'_8\ [21]\ 2 &= T\ [3]\ R_8\ [21]\ 2 \\
T'_9\ [21]\ \nu &= T\ [21]\ \nu\ R_9\ [3] \qquad (\nu = 1, 2)
\end{aligned}
$$

$$T'_{10}\ [21]\ 1 = T\ [21]\ 2\ R_{10}\ [1^3]$$

$$T'_{10}\ [21]\ 2 = -T\ [21]\ 1\ R_{10}\ [1^3] \qquad (21)$$

$$T'_{11}\ [21]\ 1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[T\ [21]\ 2\ R_{11}\ [21]\ 2 - T[21]\ 1\ R_{11}[21]\ 1 \right]$$

$$T'_{11}\ [21]\ 2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[T[21]\ 1\ R_{11}\ [21]\ 2 + T[21]\ 2\ R_{11}[21]\ 1 \right]$$

La fonction d'onde de l'état D s'écrit alors :

$$^4\varphi\ ([1^3]\ 2) = \sum_{i=8}^{11} \left[S\ T'_i\ [21]\ 1\ \xi[21]\ 2 - S\ T'_i\ [21]\ 2\ \xi[21]\ 1 \right] \qquad (22)$$

Le tableau suivant donne les différentes symétries des fonctions radiales qui sont nécessaires pour former les divers états du triton. On donne également le nombre de fonctions radiales correspondantes.

Etat	Symétries des fonctions				Nombre de fonctions
$^{22}S_{\frac{1}{2}}$	$R_1\ [3]$	$R_2\ [1^3]$	$R_3\ [21]$		4
$^{22}P_{\frac{1}{2}}$	$R_4\ [3]$	$R_5\ [1^3]$	$R_6\ [21]$		4
$^{24}P_{\frac{1}{2}}$	$R_7\ [21]$				2
$^{24}D_{\frac{1}{2}}$	$R_8\ [21]$	$R_9\ [3]$	$R_{10}\ [1^3]$	$R_{11}[21]$	6

Le nombre de fonctions nécessaires pour décrire l'état fondamental du triton est le même que celui qu'ont obtenu BLATT et DERRICK. Cependant les symétries des fonctions radiales de l'état D sont différentes : ceci est normal car nous n'utilisons pas les angles d'EULER pour construire les fonctions des variables angulaires.

III - 3 - FORMATION DES FONCTIONS DES DIFFERENTS ETATS DE LA PARTICULE α.

La particule α est formée de deux protons et deux neutrons, le nombre quantique du spin isobarique est donc T = 0. Nous savons également que le moment angulaire total est J = 0. La parité est paire. Les états spectroscopiques qui figurent dans l'état fondamental en présence de forces tensorielles sont donc les états $^{11}S_o$, $^{13}P_o$, $^{15}D_o$. Les fonctions de spin-charge sont données en appendice. Les fonctions des états quintuplets de spin possèdent la symétrie de type $[22]$. Les fonctions des états triplets appartiennent soit à la symétrie de type $[3\,1]$ soit à la symétrie de type $[21^2]$. Dans les états singulets nous rencontrons des fonctions de type $[4]$, $[1^4]$, et $[22]$.

Les fonctions de spin-charge de l'état singulet appartiennent aux trois symétries $[1^4]$, $[4]$ et $[22]$. En les combinant convenablement avec des fonctions radiales nous formons la fonction antisymétrique suivante de l'état S.

$$
\begin{aligned}
{}^1\psi\,(\,[1^4]\,,\,0\,) = R_1\,[4] \quad \xi([1^4]\,,\,00) + R_2\,[1^4] \quad \xi(\,[4]\,,\,00) \\
+ R_3\,(\,[22]\,1\,) \quad \xi(\,[22]\,2,00) \qquad (23) \\
- R_3\,(\,[22]\,2\,) \quad \xi(\,[22]\,1,00)
\end{aligned}
$$

A partir de deux des trois vecteurs $\vec{r}$, $\vec{\rho}_1$ et $\vec{\rho}_2$ nous pouvons former trois opérateurs tensoriels de l'état P de parité paire possédant la symétrie $[21^2]$.

$$
\begin{aligned}
T\,(\,[21^2]\quad 1\;;\;1\,m) &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\;(\,\vec{\rho}_2 \wedge \vec{\rho}_1\,)_m \\
T\,(\,[21^2]\quad 2\;;\;1\,m) &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\;(\,\vec{r} \wedge \vec{\rho}_2\,)_m \qquad (24) \\
T\,(\,[21^2]\quad 3\;;\;1\,m) &= -\frac{i}{\sqrt{2}}\;(\,\vec{\rho}_1 \wedge \vec{r}\,)_m
\end{aligned}
$$

En faisant le produit des opérateurs tensoriels ci-dessus et des fonctions de variables radiales nous pouvons obtenir des fonctions des variables d'espace de diverses symétries. Nous notons par le signe ⊗ le produit de deux représentations.

Les fonctions des variables d'espace de la symétrie $[21^2]$ sont données par les produits

$$
\begin{aligned}
T'_4\,[21^2] &= R_4\,[21^2] \otimes T\,[21^2] \\
T'_5\,[21^2] &= R_5\,[31] \otimes T\,[21^2] \qquad (25)
\end{aligned}
$$

$$T'_6\left[21^2\right] = R_6\left[22\right] \otimes T\left[21^2\right]$$

$$T'_7\left[21^2\right] = R_7\left[4\right] \otimes T\left[21^2\right]$$

Les fonctions de la symétrie $\left[3\,1\right]$ sont données par

$$\begin{aligned} T'_8\left[3\,1\right] &= R_8\left[21^2\right] \otimes T\left[21^2\right] \\ T'_9\left[3\,1\right] &= R_9\left[3\,1\right] \otimes T\left[21^2\right] \\ T'_{10}\left[3\,1\right] &= R_{10}\left[22\right] \otimes T\left[21^2\right] \\ T'_{11}\left[3\,1\right] &= R_{11}\left[1^4\right] \otimes T\left[21^2\right] \end{aligned} \qquad (26)$$

Les fonctions de spin-charge de l'état P sont des fonctions des états triplets de spin et possèdent les symétries $\left[3\,1\right]$ et $\left[21^2\right]$. Le produit des fonctions de spin-charge et des fonctions des variables d'espace se réduit à un produit scalaire d'opérateurs tensoriels comme nous l'avons signalé dans la première partie de ce chapitre. Les formes antisymétriques sont obtenues par les produits de fonctions de symétries duales. Donc

$$\begin{aligned} {}^3\Psi = {} & \text{Espace}\left[3\,1\right] \otimes \text{spin-charge}\left[21^2\right] \\ & + \text{Espace}\left[21^2\right] \otimes \text{spin-charge}\left[3\,1\right] \end{aligned} \qquad (27)$$

Les fonctions T'_i $(4 \leqslant i \leqslant 11)$ introduites ci-dessus sont donc les seules à intervenir pour décrire l'état P de la particule α.

Nous formons les opérateurs tensoriels de l'état D en suivant la méthode utilisée pour le triton. Nous obtenons les opérateurs suivants :

$$\begin{aligned} T\left[4\right] &= T_{r^2} + T_{\rho_1^2} + T_{\rho_2^2} \\ T\left[22\right]1 &= T_{\rho_2^2} - T_{\rho_1^2} + 2\sqrt{2}\,T_{r\rho_1} \\ T\left[22\right]2 &= 2\,T_{\rho_1\rho_2} - 2\sqrt{2}\,T_{r\rho_2} \\ T\left[3\,1\right]1 &= 2\left[T_{\rho_2^2} + T_{\rho_1^2} - 2\,T_{r^2}\right] \end{aligned} \qquad (28)$$

$$T\left[31\right]2 = \sqrt{2}\left[T_{\rho_2} - 3\,T_{\rho_1^2} - \frac{2\sqrt{2}}{3}\,T_{r\,\rho_1}\right]$$

$$T\left[31\right]3 = \frac{8}{\sqrt{2}}\left[T_{\rho_1\rho_2} + \frac{1}{\sqrt{2}}\,T_{r\,\rho_1}\right]$$

Les fonctions des variables d'espace de la symétrie $[22]$ sont données par les produits

$$\begin{aligned}
T'_{12}\left[22\right] &= R_{12}\left[22\right] \otimes T\left[4\right] \\
T'_{13}\left[22\right] &= R_{13}\left[22\right] \otimes T\left[22\right] \\
T'_{14}\left[22\right] &= R_{14}\left[1^4\right] \otimes T\left[22\right] \\
T'_{15}\left[22\right] &= R_{15}\left[4\right] \otimes T\left[22\right] \\
T'_{16}\left[22\right] &= R_{16}\left[21^2\right] \otimes T\left[31\right] \\
T'_{17}\left[22\right] &= R_{17}\left[31\right] \otimes T\left[31\right]
\end{aligned} \qquad (29)$$

Les fonctions de spin-charge de l'état D sont des fonctions de l'état quintuplet de spin et possèdent la symétrie $[22]$. Le produit des fonctions de spin-charge et des fonctions d'espace se réduit encore à un produit scalaire d'opérateurs tensoriels.

Donc :

$$^5\Psi = \text{Espace}\left[22\right] \otimes \text{spin-charge}\left[22\right] \qquad (30)$$

Les fonctions introduites pour décrire l'état fondamental de la particule α sont données dans le tableau suivant :

Etats	Symétrie des fonctions des variables radiales	Nombre de fonctions
$^{11}S_o$	$R_1 [4]$ $R_2 [1^4]$ $R_3 [22]$	4
$^{13}P_o$	$R_4 [21^2]$	
	$R_5 [31]$	
	$R_6 [22]$ $R_7 [4]$	
	$R_8 [21^2]$	
	$R_9 [31]$	
	$R_{10} [22]$ $R_{11} [1^4]$	18
$^{15}D_o$	$R_{12} [22]$ $R_{13} [22]$	
	$R_{14} [1^4]$ $R_{15} [4]$	
	$R_{16} [21^2]$	12
	$R_{17} [31]$	

CHAPITRE IV

FONCTIONS DE BASE DE SYMÉTRIE DÉFINIE POUR LES FONCTIONS D'ONDE D'UN SYSTÈME DE TROIS PARTICULES IDENTIQUES

En général la résolution pratique d'un problème quantique relatif à un système de particules, se fait en cherchant d'abord des solutions, rigoureuses ou approchées, de l'équation de SCHRÖDINGER, puis en les combinant de façon à satisfaire aux conditions de symétrie. Cet ordre des calculs est sans inconvénient dans la phase préliminaire d'une recherche où l'on se contente de solutions approchées très simples. Mais il n'en est pas de même quand on veut former des fonctions d'onde plus raffinées en superposant un grand nombre de fonctions de base. Si les conditions de symétrie sont réalisées d'emblée sur ces dernières, le nombre de coefficients inconnus est réduit au minimum. Un exemple simple est la résolution de l'équation de SCHRÖDINGER de l'atome d'HELIUM quand les fonctions de base sont déjà soit symétriques, soit antisymétriques pour l'échange des deux électrons.

Nous nous proposons d'étudier la formation de fonctions de base orthogonales de symétrie donnée dans le cas d'un système de trois particules identiques. Ces fonctions pourront servir à approcher, par développement, les diverses fonctions radiales du triton définies dans le chapitre précédent dont nous connaissons seulement le caractère de symétrie.

La méthode utilisée en général pour former des fonctions de base orthogonales consiste à les prendre fonctions propres d'un ou de plusieurs opérateurs convenablement choisis. Cependant quelques fois la formation des opérateurs est difficile, aussi nous envisagerons plusieurs méthodes de formation des fonctions de base. Ces méthodes utilisent des résultats de la théorie des groupes et sont applicables à d'autres cas.

Après avoir choisi les variables à utiliser, nous formerons d'abord les fonctions de base sans l'aide d'opérateur. Nous verrons ensuite comment on

peut former ces fonctions avec un seul opérateur et nous utiliserons à la fin deux opérateurs.

Une partie des résultats de ce chapitre a été obtenue en collaboration avec P. PLUVINAGE et G. MUNSCHY et a été publiée au Journal de Physique [41] .

IV - 1 - CHOIX DES VARIABLES.

Au cours de notre travail nous utiliserons, dans le cas du problème de trois corps, plusieurs systèmes de variables. Nous les passons en revue dans ce paragraphe.

Les fonctions des diverses symétries du triton dépendent des variables radiales r_{ij}. Malheureusement les domaines de variation des r_{ij} ne sont pas indépendants car ils doivent vérifier les inégalités du triangle. Dans un tel système de variables l'élément de volume sera choisi égal à

$$dV = 2^5 \, r_{12} \, r_{23} \, r_{31} \, dr_{12} \, dr_{23} \, dr_{31} \qquad (1)$$

Le coefficient 2^5 a été choisi par commodité pour ce qui va suivre.

Pour aboutir à un système de variables indépendantes nous pouvons combiner les r_{ij} d'une manière simple. Les variables suivantes

$$\begin{aligned} \xi &= - r_{13} + r_{23} + r_{12} \\ \eta &= r_{13} - r_{23} + r_{12} \\ \zeta &= r_{13} + r_{23} - r_{12} \end{aligned} \qquad (2)$$

sont indépendantes et prennent leurs valeurs entre zéro et l'infini.

$$0 \leqslant \xi \leqslant \infty \qquad 0 \leqslant \eta < \infty \qquad 0 \leqslant \zeta < \infty$$

L'élément de volume a pour valeur

$$dV = (\xi + \eta)(\eta + \zeta)(\zeta + \xi) \, d\xi \, d\eta \, d\zeta \qquad (3)$$

Sous l'action des opérateurs de permutation ces variables se transforment entre elles suivant les relations matricielles

$$P_{12}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\\ \zeta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\\ \zeta\end{pmatrix}$$

$$P_{13}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\\ \zeta\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\\ \zeta\end{pmatrix} \qquad (4)$$

Les polynômes orthogonaux connus à deux variables prennent leurs valeurs dans un triangle. En faisant le changement suivant

$$\begin{aligned}\xi + \eta + \zeta &= s\\ \xi &= x\,s\\ \eta &= y\,s\end{aligned} \qquad (5)$$

la variable s et les deux variables x et y prennent leurs valeurs dans deux espaces disjoints : la variable s varie de zéro à l'infini et x et y prennent leurs valeurs dans le triangle T_1 défini par les relations

$$T_1 : \quad x \geqslant 0 \qquad y \geqslant 0 \qquad x+y \leqslant 1$$

L'élément de volume est alors

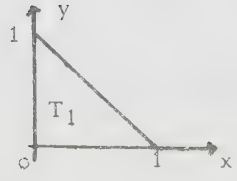
$$dV = s^5\,(x+y)\,(1-x)\,(1-y)\,ds\,dx\,dy \qquad (6)$$

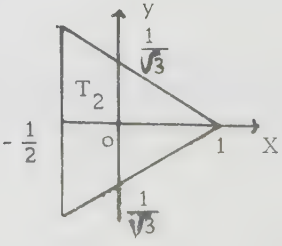
Les opérateurs de permutation agissent sur ces variables suivant les relations

$$P_{ij}\ s = s$$

$$P_{12}\ x = y \qquad P_{23}\ x = 1-x-y \qquad (7)$$

$$P_{12}\ y = x \qquad P_{23}\ y = y$$





L'action des opérateurs de permutation sur x et y ne conserve pas le degré des termes. On voit en effet apparaître un terme de degré zéro. Pour supprimer cet inconvénient faisons le changement de variables

$$x = -\frac{X}{3} + \frac{1}{\sqrt{3}} Y + \frac{1}{3}$$
$$y = -\frac{X}{3} - \frac{1}{\sqrt{3}} Y + \frac{1}{3} \qquad (8)$$

Le domaine de variation de X et de Y est le triangle équilatéral T_2 de sommets (1, 0) $(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2})$ $(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2})$ et le degré des termes est conservé par les permutations. En effet

$$P_{(12)} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} \qquad P_{(23)} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & +\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X \\ Y \end{pmatrix}$$

(9)

Nous nous servirons aussi d'une représentation équivalente dans le plan complexe définie par

$$z = X + iY$$

alors (10)

$$P_{12} \; z = \bar{z} \qquad P_{23} \; z = e^{2\frac{i\pi}{3}} \bar{z}$$

Cette représentation pourra aussi être remplacée par

$$z = r\, e^{i\varphi}$$

$$P_{ij} \; r = r \qquad P_{12}\, \varphi = -\varphi \qquad P_{23}\, \varphi = -\varphi + \frac{2\pi}{3}$$

(11)

Nous voyons que les côtés du triangle T_2 se transforment l'un dans l'autre sous l'action des opérateurs de permutation, cela résulte de l'isomorphie du groupe symétrique de degré trois et du groupe du triangle équilatéral.

L'élément de volume a pour valeur

$$dV = \frac{2}{3\sqrt{3}} s^5 \, . \, b \, ds \, . \, dr. \, r. \, d\varphi \qquad (12)$$

avec $b = \frac{2}{27} (-r^3 \cos 3\varphi - 3r^2 + 4)$

IV - 2 - METHODE DIRECTE DE FORMATION DES FONCTIONS.

La méthode la plus simple pour former des fonctions de symétrie définie des trois variables r_{12}, r_{23} et r_{31} est de combiner entre eux les termes de même degré.

Avec les trois termes de degré 1 : r_{12}, r_{23} et r_{31} nous pouvons former les fonctions suivantes possédant une symétrie définie.

$$
\begin{aligned}
f^{(1)}\,[3] &= r_{12} + r_{23} + r_{31} \\
f^{(1)}\,[21]\;1 &= r_{12} - \frac{1}{2}\, r_{23} - \frac{1}{2}\, r_{31} \\
f^{(1)}\,[21]\;2 &= \frac{\sqrt{3}}{2}\,(r_{23} - r_{31})
\end{aligned}
\qquad (13)
$$

Nous pouvons également former six fonctions de symétrie définie en réduisant la représentation ayant pour base r_{ij}^2, $r_{ij}\, r_{kl}$. Cependant il est plus simple d'utiliser les relations des produits de deux représentations donnés au paragraphe 8 du chapitre II. En partant des trois fonctions ci-dessus de degré un par rapport aux variables nous pouvons former les fonctions suivantes de degré deux :

$$
\begin{aligned}
f^{(2)}_{1}\,[3] &= (f^{(1)}\,[21]\;1)^2 + (f^{(1)}\,[21]\;2)^2 \\
f^{(2)}_{2}\,[3] &= (f^{(1)}\,[3])^2 \\
f^{(2)}_{1}\,[21]\;1 &= f^{(1)}\,[3] \times f^{(1)}\,[21]\;1 \\
f^{(2)}_{1}\,[21]\;2 &= f^{(1)}\,[3] \times f^{(1)}\,[21]\;2 \\
f^{(2)}_{2}\,[21]\;1 &= (f^{(1)}\,[21]\;2)^2 - (f^{(1)}\,[21]\;1)^2 \\
f^{(2)}_{2}\,[21]\;2 &= 2\, f^{(1)}\,[21]\;1 \quad f^{(1)}\,[21]\;2
\end{aligned}
\qquad (14)
$$

Cette méthode est applicable à des degré supérieurs.

Au lieu de prendre r_{ij} comme variables, nous aurions pu prendre toute autre fonction de r_{ij}. Par exemple

$$
\begin{aligned}
f\,[3] &= e^{-r_{12}} + e^{-r_{23}} + e^{-r_{31}} \\
f\,[21]\;1 &= e^{-r_{12}} - \frac{1}{2}\, e^{-r_{23}} - \frac{1}{2}\, e^{-r_{31}}
\end{aligned}
$$

$$f\ [21]\ 2\ = \frac{\sqrt{3}}{2}\ (e^{-r_{23}} - e^{-r_{31}}) \qquad (15)$$

Les relations restent les mêmes.

IV - 3 - FORMATION DE POLYNOMES A L'AIDE D'UN OPERATEUR.

L'ensemble des fonctions propres d'un opérateur entièrement symétrique forme une base pour la représentation du groupe symétrique de degré trois. En général ces fonctions propres ne possèdent pas de caractère de symétrie, mais d'après le théorème de WIGNER nous savons que nous pouvons réduire la représentation ainsi formée en représentations irréductibles. Les nouvelles fonctions obtenues possèdent les caractères de symétrie désirés.

Notre travail consistera donc à chercher un opérateur approprié et à réduire la représentation que nous obtiendrons par l'intermédiaire des fonctions propres. L'opérateur que nous envisagerons nous amènera à considérer deux familles de polynômes. Nous ferons les calculs pour chacune de ces familles.

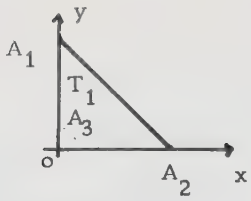
a) - Opérateur d'APPELL et KAMPE de FERIET.

Nous nous proposerons de déterminer des polynômes en x et y définis dans le triangle T_1. Nous les définirons comme fonctions propres d'un opérateur auto-adjoint dans T_1. La fonction de poids est prise égale à l'unité. Nous désignerons cet opérateur par $K^{(n)}$, n est son ordre. $K^{(n)}$ doit être entièrement symétrique, c'est-à-dire invariant pour n'importe quelle permutation du groupe symétrique de degré trois défini par les deux transpositions :

$$(12)\ \begin{cases} x \text{ est changé en } y \ ; \ \dfrac{\partial}{\partial x} \text{ est changé en } \dfrac{\partial}{\partial y} \\ y \text{ est changé en } x \ ; \ \dfrac{\partial}{\partial y} \text{ est changé en } \dfrac{\partial}{\partial x} \end{cases} \qquad (16)$$

$$(23)\ \begin{cases} x \text{ est changé en } 1-x-y \ ; \ \dfrac{\partial}{\partial x} \text{ est changé en } -\dfrac{\partial}{\partial x} \\ y \text{ est changé en } \quad y \ , \ \dfrac{\partial}{\partial y} \text{ est changé en } \dfrac{\partial}{\partial y} - \dfrac{\partial}{\partial x} \end{cases}$$

Pour n nous serons amenés à adopter la valeur deux. Nous allons montrer dans ce qui suit, que l'opérateur $K^{(2)}$ coïncide avec l'opérateur d'APPELL et KAMPE DE FERIET [401]



Donnons une définition de l'opérateur d'APPELL adaptée à la présente étude. Soient A_1, A_2, A_3 les sommets du triangle T_1. Nous nous servirons des équations des côtés

$$D_{31} \equiv x = 0$$

$$D_{23} \equiv y = 0 \qquad (17)$$

$$D_{12} \equiv 1-x-y = 0$$

et nous utiliserons aussi les gradients dans les directions $A_2 A_3$, $A_3 A_1$, $A_1 A_2$:

$$\frac{\partial}{\partial n_{31}} = + \frac{\partial}{\partial y} \qquad \frac{\partial}{\partial n_{23}} = - \frac{\partial}{\partial x} \qquad \frac{\partial}{\partial n_{12}} = - \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial x} \qquad (18)$$

Pour trouver des opérateurs auto-adjoints, il est commode de passer par la forme quadratique associée ; celle-ci doit respecter les conditions suivantes: elle doit être totalement symétrique ; dans la variation du premier ordre de son intégrale sur T_1, les termes intégrés pris sur le contour doivent être nuls ; le degré en x et y doit être égal à l'ordre de dérivation maximum pour que les fonctions propres puissent être des polynômes. Seuls des degrés pairs sont à considérer et le cas le plus simple est le deuxième ordre pour K, donc le deuxième degré pour la forme associée.

L'expression suivante remplit les conditions désirées de symétrie et dans la variation du premier ordre de son intégrale sur T_1 les termes intégrés pris sur le contour sont nuls.

$$Q_2 [F] = \frac{1}{2} \left(D_{12} D_{31} \left(\frac{\partial F}{\partial n_{23}} \right)^2 + D_{23} D_{12} \left(\frac{\partial F}{\partial n_{31}} \right)^2 + D_{31} D_{23} \left(\frac{\partial F}{\partial n_{12}} \right)^2 \right) \qquad (19)$$

Le coefficient $\frac{1}{2}$ a été choisi pour retrouver l'opérateur d'APPELL.

Le problème de variation qui mène à la définition de $K^{(2)}$ s'énonce ainsi

$$J = \iint_{T_1} Q_2 (F) \, dx \, dy$$

$$\delta J = 0 \text{ sous la condition } \iint_{T_1} F^2 \, dx \, dy = C^{te} \tag{20}$$

L'expression de $K^{(2)}$ est

$$K^{(2)} \equiv \frac{\partial}{\partial n_{23}} D_{12} D_{31} \frac{\partial}{\partial n_{23}} + \frac{\partial}{\partial n_{31}} D_{23} D_{12} \frac{\partial}{\partial n_{31}} \tag{21}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial n_{12}} D_{31} D_{23} \frac{\partial}{\partial n_{12}}$$

ou

$$K^{(2)} \equiv \frac{\partial}{\partial x} \left(x(1-x) \frac{\partial}{\partial x} - xy \frac{\partial}{\partial y} \right) \tag{22}$$

$$+ \frac{\partial}{\partial y} \left(- xy \frac{\partial}{\partial x} + y(1-y) \frac{\partial}{\partial y} \right)$$

C'est l'expression habituelle de l'opérateur d'APPELL et KAMPE de FERIET, le seul qui jouisse des propriétés de symétrie entière.

Nous cherchons une fonction propre de $K^{(2)}$ qui soit un polynôme de degré N de la forme

$$H(x, y) = \sum_{\substack{i=0 \\ i+j=N}}^{\quad j=0} a_{ij} x^i y^j \tag{23}$$

$$K^{(2)} H(x, y) = \lambda H(x, y)$$

Les a_{ij} sont des constantes et λ est la valeur propre. Le calcul montre que cette solution est acceptable si λ a pour valeur

$$\lambda = - N (N + 2) \tag{24}$$

La valeur propre est donc dégénérée d'ordre N+1

On peut considérer $K^{(2)}$ comme la somme de trois opérateurs non indépendants

$$K^{(2)} = G_1 + G_2 + G_3$$

$$G_1 = \frac{\partial}{\partial n_{12}} D_{31} D_{23} \frac{\partial}{\partial n_{12}} \qquad (25)$$

G_2 et G_3 s'obtiennent à partir de G_1 par une permutation cyclique des deux indices. G_1 ne change pas quand on échange les indices 1 et 2. En outre chaque opérateur commute avec $K^{(2)}$ comme on peut le vérifier directement.

b) Fonctions propres de l'opérateur d'APPELL.

Nous connaissons jusqu'ici deux familles de polynômes qui sont fonctions propres de l'opérateur $K^{(2)}$: les polynômes F_{mn} d'APPELL et KAMPE de FERIET [405] et les polynômes F_{Nn} de MUNSCHY et PLUVINAGE [406] [407] [410].

Les polynômes d'APPELL de degré $N = m + n$ généralisent la fonction hypergéométrique ${}_2F_1$: ils sont définis par les relations suivantes

$$K^{(2)} F_{mn} = - (m+n) (m+n+2) F_{mn}$$

$$K^{(2)} E_{mn} = - (m+n) (m+n+2) E_{mn}$$

$$E_{mn} = \sum_{ij} \frac{(m+n+2, i+j) (-m, i) (-n, j)}{(1, i) (1, j) (1, i) (1, j)} x^i y^j$$

$$F_{mn} = \sum_{ij} \frac{(-m-n, i+j) (m+1, i) (n+1, j)}{(1, i) (1, j) (1, i) (1, j)} x^i y^j$$

où $(\gamma, 0) = 1$, $(\gamma, i) = \gamma (\gamma + 1) \ldots (\gamma + i - 1)$ (26)

$$F_{mn} = \frac{1}{m!\ n!} \frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m \partial y^n} \left(x^m y^n (1-x-y)^{m+n} \right)$$

$$\iint_{T_1} F_{m'n'} F_{mn} \, dx \, dy = C_{mn}^{m'n'} \delta_{NN'}$$

avec $$C^{m'\,n'}_{mn} = \frac{[N!]^2 \; (m+m')! \; (n+n')!}{(2N+2)! \; m! \; m'! \; n! \; n'!}$$

et $N = m+n \qquad N' = m'+n'$

$$\iint_{T_1} E_{m'\,n'} \; F_{mn} \; dx \, dy = K^{mn}_{mn} \; \delta_{mm'} \; \delta_{nn'} \quad \text{avec } K^{mn}_{mn} = \frac{1}{2(N+1)^2}$$

Les polynômes de MUNSCHY et PLUVINAGE, de degré N sont fonctions propres des opérateurs $K^{(2)}$ et G_1

$$K^{(2)} \; F_{N\nu} = - N(N+2) \; F_{N\nu}$$

$$G_1 \; F_{N\nu} = - \nu (\nu + 1) \; F_{N\nu} \qquad (27)$$

Les polynômes normés $F^{+}_{N\nu}$ se mettent sous la forme

$$F^{+}_{N\nu}(x,y) = \left((N+1) \; (2\nu + 1) \right)^{\frac{1}{2}} \; (x+y)^{\nu} \; P^{(0,2\nu+1)}_{N-\nu} (2x+2y-1) \cdot$$

$$P_{\nu} \left(\frac{y-x}{y+x} \right)$$

Dans la formule ci-dessus nous suivons la notation d'ERDELYI [403] : $P^{(\alpha,\beta)}_{i}(x)$ désigne un polynôme de JACOBI de degré i et

$P_i(x)$ désigne un polynôme de Légendre.

c) - Formation des polynômes de symétrie définie.

Nous possédons deux familles de (N+1) polynômes de degré N, qui n'ont aucun caractère de symétrie, mais qui forment la base d'une représentation réductible. Notre but est de réduire cette représentation afin de former des polynômes de symétrie définie. Pour réduire la représentation nous devons connaître l'action des opérateurs de permutation sur la base.

Nous commençons par étudier les polynômes d'APPELL. Les propriétés de ces polynômes nous permettent d'écrire d'abord

$$P_{12} \; F_{mn} = F_{nm} \qquad (28)$$

Le polynôme $P_{23}\ F_{mn}$ étant de degré (m+n) en x et y peut se développer en série de polynômes $F_{m'n'}$ de degré m+n

$$P_{23}\ F_{mn} = \sum_{m'\,n'} \theta_{mn}^{m'n'}\ F_{m'n'} \qquad (29)$$

En multipliant par $E_{m'n'}$ et intégrant dans T_1 nous obtenons

$$K_{m'n'}^{m'n'}\ \theta_{mn}^{m'n'} = \iint_{T_1} E_{m'n'}\ (P_{23}\ F_{mn})\ dx\ dy \qquad (30)$$

Les opérateurs de permutation étant unitaires, nous pouvons écrire :

$$\iint_{T_1} E_{m'n'}\ (P_{23}\ F_{mn})\ dx\ dy = \iint_{T_1} F_{mn}\ (P_{23}\ E_{m'n'})\ dx\ dy$$

La deuxième partie de cette égalité nous donne en intégrant (m+n) fois par partie

$$\frac{(-1)^{m+n}}{m!\ n!} \iint_{T_1} x^m y^n (1-x-y)^{m+n}\ \frac{\partial^{m+n}}{\partial x^m\ \partial y^n}\ (P_{23}\ E_{m'n'})\ dx\ dy$$

Cette intégrale est égale à $K_{m'n'}^{m'n'}\ C_n^{n'}$ où $C_n^{n'} = \dfrac{n!}{n'!\ (n-n')!}$

Nous obtenons pour l'action des opérateurs $P_{(ij)}$ sur F_{mn}

$$P_{23}\ F_{mn} = (-1)^{m+n} \sum_{m'n'} (-1)^{n'}\ C_n^{n'}\ F_{m'n'}$$

$$P_{13}\ F_{mn} = (-1)^{m+n} \sum_{m'n'} (-1)^{m'}\ C_m^{m'}\ F_{m'n'} \qquad (31)$$

A partir des opérateurs P_{ij} nous pouvons connaître l'action de n'importe quel opérateur R du groupe des permutations. Si nous représentons la base par la matrice (F_{mn}) l'action de l'opérateur de permutation se traduira par la relation matricielle

$$P_R\ (F_{mn}) = (P_R)\ (F_{mn})$$

Les matrices (P_R) forment une représentation réductible du groupe. Le nombre de fois que la représentation irréductible F^j est contenue dans (P_R) est donné par la relation tirée de la théorie des caractères

$$n_j = \frac{1}{6} \sum_R \chi(R)\, \chi_j(R) \qquad (32)$$

où $\chi(R)$ est le caractère de (P_R) et $\chi_j(R)$ le caractère de la matrice correspondante dans la représentation irréductible.

Je n'ai pas cherché une formule générale pour la réduction d'un degré quelconque. Cependant il est relativement aisé de calculer les premiers polynômes. Ci-dessous nous donnons, en exemple, la formation des polynômes de degré deux.

La base est formée par les polynômes F_{20}, F_{11} et F_{02}

$$P_{12} \begin{pmatrix} F_{20} \\ F_{11} \\ F_{02} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & 1 \\ & 1 & \\ 1 & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{20} \\ F_{11} \\ F_{02} \end{pmatrix} \qquad (33)$$

$$P_{23} \begin{pmatrix} F_{20} \\ F_{11} \\ F_{02} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_{20} \\ F_{11} \\ F_{02} \end{pmatrix}$$

$$P_{12}\, P_{23} = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 \\ 1 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

P_{12} et $P_{12}\, P_{23}$ appartiennent à deux classes différentes dont les caractères sont 1 et 0. En appliquant la relation du paragraphe 4 du chapitre II nous trouvons que la représentation [3] y figure une fois et la représentation [21] une fois également alors que la représentation $[1^3]$ n'y figure pas.

Nous obtenons ainsi les polynômes

$$P\ ([3]\ ;\ 2) = \left(F_{20} + F_{02} - F_{11} \right)$$
$$P\ ([21]\ 1\ ;2) = \left(4\ F_{11} - F_{20} - F_{02} \right) \qquad (34)$$
$$P\ ([21]\ 2\ ;2) = \left(F_{20} - F_{02} \right)$$

Nous donnons en appendice les polynômes des premiers degrés.

D'après les propriétés générales des polynômes d'APPELL nous savons que les polynômes de degrés différents sont orthogonaux. Dans l'ensemble des polynômes de même degré, le théorème de WIGNER nous apprend que les polynômes possédant des caractères de symétrie différents sont orthogonaux.

Les relations donnant l'action des opérateurs de permutation sur les polynômes de MUNSCHY-PLUVINAGE sont plus difficiles à obtenir que précédemment. L'opérateur de permutation ne change pas le degré du polynôme. Par conséquent :

$$P_{23}\ F^{+}_{N\nu} = \sum_{i} a_{\nu i}\ F^{+}_{Ni} \qquad (35)$$

Pour calculer les coefficients $a_{\nu i}$ nous pouvons écrire que la somme $a_{\nu i}$ F^{+}_{Ni} est fonction propre de l'opérateur $P_{23}\ G_1$ qui est l'opérateur G_2 rencontré au § IV-3-a. Nous obtenons

$$P_{23}\ G_1\ F_{N\nu} = -\ \nu\ (\ \nu + 1)\ P_{23}\ F_{N\nu} \qquad (36)$$

$$\sum_{i} a_{\nu\ i}\ (G_2\ F^{+}_{Ni}) = \sum_{i} -\ \nu(\ \nu + 1)\ a_{\nu\ i}\ F^{+}_{Ni}$$

Pour continuer le calcul nous avons besoin de connaître l'action de l'opérateur G_2 sur les polynômes $F^{+}_{N\nu}$. Cet opérateur ne change pas encore le degré des polynômes. Donc

$$G_2\ F^{+}_{N\nu} = \sum_{j} b_{\nu j}\ F^{+}_{Nj} \qquad (37)$$

Pour effectuer simplement ce calcul faisons le changement de variable

$$2x = p(1-q)\ ,\ 2y = p\ (1+q)\ ,\ 0 \leqslant p \leqslant 1\ ,\ -1 \leqslant q \leqslant 1 \qquad (38)$$

et comme nous ne sommes intéressés que par les coefficients $b_{\nu\, j}$ qui ne dépendent que de ν et j, projetons dans le sous-espace p = 1

$$(G_2)' = -\frac{1}{2}\left[(1-q^2)\frac{\partial}{\partial q} + (1+q)\left(N(N+2) + G_1\right)\right] \qquad (39)$$

$$(F^+_{N\nu})' = \left((N+1)(2\nu+1)\right)^{\frac{1}{2}} P_\nu(q)$$

Dans ce sous-espace, la relation devient

$$(G_2)' P_\nu(q) = \sum_j b_{\nu j} \left(\frac{2j+1}{2\nu+1}\right)^{1/2} P_j(q) \qquad (40)$$

L'action de l'opérateur $(G_2)'$ sur P_ν nous permet de calculer les $b_{\nu j}$. Les seuls coefficients non nuls sont

$$b_{\nu,\nu-1} = -\frac{1}{2}\,\frac{\nu}{(4\nu^2-1)^{1/2}}\left(N(N+2) - \nu^2+1\right)$$

$$b_{\nu,\nu} = -\frac{1}{2}\left(N(N+2) - \nu(\nu+1)\right) \qquad (41)$$

$$b_{\nu,\nu+1} = -\frac{1}{2}\,\frac{(\nu+1)}{\left((2\nu+1)(2\nu+3)\right)^{1/2}}\left(N(N+2) - \nu(\nu+2)\right)$$

Nous portons les valeurs ci-dessus et nous obtenons

$$\sum_i a_{\nu i}\left(b_{i,i-1} F^+_{N,i-1} + b_{ii} F^+_{Ni} + b_{i,i+1} F^+_{N,i+1}\right) = -\nu(\nu+1)\sum_i a_{\nu i} F^+_{Ni} \qquad (42)$$

d'où nous tirons la relation de récurrence entre trois termes successifs

$$a_{\nu,i+1}\, b_{i+1,i} + a_{\nu i}\left(b_{ii} + \nu(\nu+1)\right) + a_{\nu,i-1}\, b_{i-1,i} = 0 \qquad (43)$$

Nous avons calculé les premiers termes en projetant dans le sous-espace p = 1 et en utilisant les propriétés d'orthogonalité des polynômes de JACOBI

$$a_{\nu_0} = (-1)^{N-\nu} \frac{(2\nu+1)}{N+1}^{1/2}$$

$$a_{\nu_1} = (-1)^{N-\nu} \frac{[3(2\nu+1)]}{N(N+1)(N+2)}^{1/2} \left[2\nu(\nu+1) - N(N+2)\right] \tag{44}$$

IV - 4 - FORMATION DES POLYNOMES A L'AIDE DE DEUX OPERATEURS [411].

Dans le cas qui nous intéresse, les polynômes à deux variables peuvent être également formés en les obligeant à être fonctions propres de deux opérateurs entièrement symétriques qui commutent entre eux.

$$K^{(2)} F = - N (N+2) F$$

et

$$K^{(n)} F = \lambda F \tag{45}$$

a) Opérateur du quatrième ordre.

L'opérateur $K^{(2)}$ est le seul opérateur convenable du deuxième ordre auto-adjoint et entièrement symétrique. L'opérateur $K^{(n)}$ devra donc être choisi du quatrième ordre et posséder les mêmes propriétés que $K^{(2)}$.

Pour former l'opérateur $K^{(4)}$ nous pouvons suivre la méthode qui a été utilisée pour le second ordre. Nous cherchons d'abord une forme quadratique répondant aux diverses conditions. Une possibilité simple est

$$Q_4[F] = \frac{1}{2} \mathcal{S} D_{12}^2 D_{31}^2 \left(\frac{\partial^2 F}{\partial n_{23}^2}\right)^2 \tag{46}$$

où $\mathcal{S}$ symbolise la sommation en permutant les indices.

L'opérateur correspondant s'écrit

$$K'^{(4)} = \mathcal{S} \frac{\partial^2}{\partial n_{23}^2} D_{12}^2 D_{31}^2 \frac{\partial^2}{\partial n_{23}^2} \tag{47}$$

Il faut d'abord être sûr qu'il commute avec $K^{(2)}$. Une transformation donne

$$K'^{(4)} = S\ (G_1^2 + 2\ G_1)$$

G_1 commutant avec $K^{(2)}$ le nouvel opérateur commute aussi. Il est manifeste d'autre part qu'il est indépendant de $K^{(2)}$. Pour le choix de l'opérateur définitif $K^{(4)}$ nous profiterons d'une certaine latitude de formation. Les coefficients a et b étant arbitraires nous pouvons écrire d'une manière générale

$$K^{(4)} = K'^{(4)} + a \left[K^{(2)}\right]^2 + b\, K^{(2)} \qquad (49)$$

Dans la suite nous utiliserons les deux combinaisons suivantes

$$K_\alpha^{(4)} = G_1^2 + G_2^2 + G_3^2 \qquad (50)$$

où

$$a = 0 \quad \text{et} \quad b = -2$$

et

$$K_\beta^{(4)} = K'^{(4)} - \frac{3}{4}\left[K^{(2)}\right]^2 - 2\,K^{(2)} \qquad (51)$$

Les valeurs propres λ_α et λ_β de ces deux opérateurs, pour les mêmes polynômes, ne sont pas indépendantes, elles vérifient la relation

$$\lambda^\alpha - \lambda^\beta = \frac{3}{4} N^2 \quad (N+2)^2 \qquad (52)$$

b) Développement en série de polynomes d'APPELL ou de polynomes de MUNSCHY-PLUVINAGE.

Nous savons que les polynômes cherchés sont fonctions propres de $K^{(2)}$ et $K^{(4)}$. Nous connaissons également des polynômes qui sont fonctions propres de $K^{(2)}$: ce sont les polynômes d'APPELL et les polynômes de MUNSCHY-PLUVINAGE, il est donc naturel de développer les polynômes cherchés suivant des polynômes connus.

Nous allons commencer par les polynômes d'APPELL. Nous posons

$$P_N = \sum_{(i+j=N)} \gamma_{ij}\ F_{ij} \qquad (53)$$

La sommation est étendue à tous les polynomes d'APPELL de degré N(i+j=N). N désigne le degré du polynôme P. Nous devons imposer au polynome P_N d'être d'être fonction propre de $K_\alpha^{(4)}$

$$K_\alpha^{(4)} \; P_N = \lambda_k^\alpha \; P_N \tag{54}$$

Pour écrire cette égalité nous devons connaître l'action de l'opérateur $K_\alpha^{(4)}$ sur les polynômes F_{mn}. $K^{(4)} F_{mn}$ est de degré m+n en x et y. Nous pouvons donc poser

$$K_\alpha^{(4)} \; F_{mn} = \sum_{m'+n'=m+n} M_{mn}^{m'\,n'} \; F_{m'\,n'} \tag{55}$$

En nous servant de formules établies par G. MUNSCHY [405] nous trouvons que les seuls coefficients $M_{mn}^{m'n'}$ non nuls sont les suivants :

$$\begin{aligned}
M_{mn}^{m-2\;n+2} &= 2\,m\,(m-1)\,(n+1)\,(n+2) \\
M_{mn}^{m-1\;n+1} &= -\,2\,m\,(n+1)\,(2\,mn+2\,m-n^2-2n-2) \\
M_{mn}^{mn} &= 2\left(m(n+1)+n(m+1)\right)^2 + \left(m(m+1)-n(n+1)\right)^2 \\
M_{mn}^{m+1\;n-1} &= -\,2\,n(m+1)\,(2mn+2n-m^2-2m-2) \\
M_{mn}^{m+2\;n-2} &= 2\,n(n-1)\,(m+1)\,(m+2)
\end{aligned} \tag{56}$$

En portant ces valeurs dans l'équation aux valeurs propres de l'opérateur $K_\alpha^{(4)}$ nous obtenons un système d'équations homogènes des inconnues γ_{ij}

$$f(m'n') \equiv \sum_{i+j=k} \gamma_{ij} \left(\lambda_k \, \delta_{ij}^{m'\,n'} - M_{ij}^{m'n'} \right) = 0 \qquad (m'+n' = k)$$

Ce système est soluble si le déterminant est nul

$$\left| \lambda_k \; \delta_{ij}^{m'n'} - M_{ij}^{m'n'} \right| = 0 \tag{57}$$

L'équation ainsi obtenue permet de déterminer les valeurs λ_k compatibles et également de calculer les coefficients γ_{ij}

Dans le calcul pratique des γ_{ij} on tient compte du fait que les polynômes $P([3])$ et $P([21],1)$ sont invariants lorsqu'on permute x et y, tandis que les polynômes $P([1^3])$ et $P([21],2)$ changent de signe pour la même opération. En tenant compte des propriétés des polynômes F_{mn}

$$P([3]) \quad \text{et} \quad P([21],1) \text{ sont donnés par} \quad \sum \gamma_{ij} (F_{ij} + F_{ji})$$
$$P([1^3]) \quad \text{et} \quad P([21],2) \text{ sont donnés par} \quad \sum \gamma_{ij} (F_{ij} - F_{ji}) \qquad (58)$$

Au lieu d'employer les polynomes d'APPELL nous pouvons employer les polynômes normés de MUNSCHY-PLUVINAGE. La méthode générale est la même. Pour déterminer l'action de $K_\alpha^{(4)}$ sur les polynômes normés $F^+_{N\nu}$ nous nous servons de la relation, trouvée au paragraphe précédent, donnant l'action de G_2 sur $F^+_{N\nu}$.

En tenant compte de la relation $G_3 = P_{12} \cdot (G_2)$ nous calculons ainsi les coefficients $M^{N\nu'}_{N\nu}$. Les seuls coefficients non nuls sont les suivants

$$M^{N\nu-2}_{N\nu} = \frac{1}{2} \frac{\nu(\nu-1)(N+\nu)(N+\nu+1)(N-\nu+1)(N-\nu+2)}{(2\nu-1)\left[(2\nu-3)(2\nu+1)\right]^{1/2}}$$

$$M^{N\nu}_{N\nu} = \frac{1}{2} \left\{ 2\nu^2(\nu+1)^2 + \left[N(N+2) - \nu(\nu+1)\right]^2 + \frac{\nu^2(N+\nu+1)^2(N-\nu+1)^2}{(2\nu+1)(2\nu-1)} + \frac{(\nu+1)^2(N+\nu+2)^2(N-\nu)^2}{(2\nu+1)(2\nu+3)} \right\} \qquad (59)$$

$$M^{N\nu+2}_{N\nu} = \frac{1}{2} \frac{(\nu+1)(\nu+2)(N+\nu+2)(N+\nu+3)(N-\nu-1)(N-\nu)}{(2\nu+3)\left[(2\nu+1)(2\nu+5)\right]^{1/2}}$$

Des tableaux donnent en appendice les polynômes calculés à l'aide de cette méthode ainsi que les valeurs propres des divers opérateurs.

c) Développement des polynômes sous la forme trigonométrique.

Jusqu'ici, en nous aidant de deux opérateurs appropriés, nous avons pu déterminer les polynômes de symétrie définie des premiers degrés. Les renseignements manquent sur le nombre de polynômes d'une symétrie donnée et d'un degré donné. L'action des opérateurs sur les polynômes est assez compliquée. En considérant la variable z définie plus haut nous avons vu que l'action des opérateurs sur cette variable est très simple. En développant nos polynômes en série de z nous allons obtenir des renseignements nouveaux.

Les opérateurs ne changent pas le degré des expressions en X et Y. Un polynôme homogène de degré m reste homogène et de degré m. Tout polynôme P peut être considéré comme une somme de polynômes homogènes Q_N. Il suffit donc d'assurer une symétrie donnée aux Q_N.

Utilisant la représentation complexe nous pouvons écrire

$$Q_N = \frac{1}{2} \sum_{p=0}^{N} a_{Np} \; z^p \; (\bar{z})^{N-p} \qquad (60)$$

avec la condition de réalité

$$a_{Np} = \bar{a}_{N,N-p}$$

Le coefficient $\frac{1}{2}$ est destiné à simplifier l'écriture des expressions finales.

Il faut exprimer que sous l'action des opérateurs de permutation, le polynôme Q_N subit les changements caractéristiques des différentes symétries.

Le polynôme sera entièrement symétrique si

$$Q_N([3]) \equiv P_{12} \, Q_N([3]) \equiv P_{23} \, Q_N([3]) \qquad (61)$$

Il suffit d'imposer

$$\sum_p a_{Np} \; z^p \; (\bar{z})^{N-p} \equiv \sum_p a_{Np} \; (\bar{z})^p \; z^{N-p}$$

$$\equiv \sum_p a_{Np} \; (\bar{z})^p \; z^{N-p} \; e^{(N-2p)\frac{2\pi i}{3}} \qquad (62)$$

Il en résulte :

$$a_{Np} = a_{N,N-p}$$

$$e^{(N-2p)\frac{2\pi i}{3}} = 1 \qquad (63)$$

Les coefficients a_{Np} sont réels. En outre, l'entier p doit être de la forme $\frac{1}{2}(N-3q)$, q entier positif ou nul inférieur à la partie entière de $\frac{N}{3}$

$$0 \leqslant q \leqslant E\left(\frac{N}{3}\right) \qquad (64)$$

Deux cas sont à distinguer suivant que N est pair ou impair

N = 2k : q doit être pair et p est de la forme k-3n.

En modifiant la signification du second indice on obtient l'expression générale

$$Q_{2k}\left([3]\right) = \sum_{n=0}^{n'} \frac{1}{2}\, a_{2k,n}\left([3]\right)\,(zz)^{k-3n}\,(z^{6n} + (\bar{z})^{6n}) \qquad (65)$$

$$n' = E\left(\frac{k}{3}\right)$$

N = 2k+1 : q doit être impair et p est de la forme k-3n-1 (65)

$$Q_{2k+1}\left([3]\right) = \sum_{n=0}^{n'} \frac{1}{2}\, a_{2k+1,n}\left([3]\right)\,(zz)^{-k-3n-1}\,(z^{6n+3} + (\bar{z})^{6n+3})$$

$$n' = E\left(\frac{k-1}{3}\right)$$

On obtient des formes équivalentes en utilisant les coordonnées polaires

$$Q_{2k}\left([3]\right) = r^{2k} \sum_{n=0}^{n'} a_{2k,n}\left([3]\right) \cos 6n\varphi \qquad n'=E\left(\frac{k}{3}\right)$$

(66)

$$Q_{2k+1}\left([3]\right) = r^{2k+1} \sum_{n=0}^{n'} a_{2k+1,n}\left([3]\right) \cos(6n+3)\varphi \qquad n'=E\left(\frac{k-1}{3}\right)$$

La vérification de l'invariance est immédiate sur ces expressions.

La détermination de la forme générale des polynômes possédant les autres types de symétrie s'effectue de façon analogue et nous ne donnons que les résultats en coordonnées polaires

$$Q_{2k}\left([1^3]\right) = r^{2k} \sum_{n=1}^{n'} a_{2k,n}\left([1^3]\right) \sin 6n\varphi \qquad n'=E\left(\frac{k}{3}\right)$$

(67)

$$Q_{2k+1}\left([1^3]\right) = r^{2k+1} \sum_{n=0}^{n'} a_{2k+1,n}\left([1^3]\right) \sin(6n+3)\varphi \qquad n'=E\left(\frac{k-1}{3}\right)$$

$$Q_{2k}\left(\left[21\right]1\right) = r^{2k}\left[\sum_{n=0}^{n'} a^{(1)}_{2k,n}\left(\left[21\right]1\right)\cos(6n+2)\varphi + \sum_{n=0}^{n''} a^{(2)}_{2k,n}\left(\left[21\right]1\right)\cos(6n+4)\varphi\right] \quad (68)$$

$$Q_{2k}\left(\left[21\right]2\right) = r^{2k}\left[\sum_{n=0}^{n'} a^{(1)}_{2k,n}\left(\left[21\right]2\right)\sin(6n+2)\varphi + \sum_{n=0}^{n''} a^{(2)}_{2k,n}\left(\left[21\right]2\right)\sin(6n+4)\varphi\right]$$

$$n' = E\left(\frac{k-1}{3}\right) \qquad n'' = E\left(\frac{k-2}{3}\right)$$

$$Q_{2k+1}\left(\left[21\right]1\right) = r^{2k+1}\left[\sum_{n=0}^{n'} a^{(1)}_{2k+1,n}\left(\left[21\right]1\right)\cos(6n+1)\varphi + \sum_{n=0}^{n''} a^{(2)}_{2k+1,n}\left(\left[21\right]1\right)\cos(6n+5)\varphi\right] \quad (69)$$

$$Q_{2k+1}\left(\left[21\right]2\right) = r^{2k+1}\left[\sum_{n=0}^{n'} a^{(1)}_{2k+1,n}\left(\left[21\right]2\right)\sin(6n+1)\varphi + \sum_{n=0}^{n''} a^{(2)}_{2k+1,n}\left(\left[21\right]2\right)\sin(6n+5)\varphi\right]$$

$$n' = E\left(\frac{k}{3}\right) \qquad n'' = E\left(\frac{k-2}{3}\right)$$

En outre nous avons les relations suivantes entre les coefficients

$$a^{(1)}_{2k,n}\left(\left[21\right]2\right) = -\,a^{(1)}_{2kn}\left(\left[21\right]1\right)$$

$$a^{(2)}_{2k,n} \quad ([21]\,2) = a^{(2)}_{2kn} \quad ([21]\,1)$$

$$a^{(1)}_{2k+1,n} \quad ([21]\,2) = a^{(1)}_{2k+1,n} \quad ([21]\,1) \qquad (70)$$

$$a^{(2)}_{2k+1,n} \quad ([21]\,2) = a^{(2)}_{2k+1,n} \quad ([21]\,1)$$

Elles découlent des propriétés de symétrie exigées.

On peut alors dresser un tableau donnant le nombre de polynômes homogènes indépendants de degré N et de symétrie spécifiée

Degré	Symétrie	Antisymétrie	Symétrie intermédiaire
0	1	0	0
1	0	0	2
2	1	0	2
3	1	1	2
4	1	0	4
5	1	1	4
6	2	1	4
7	1	1	6
8	2	1	6
...	...	...	...

On déduit de ce tableau qu'un polynôme de degré 8 par exemple est une combinaison linéaire de dix polynômes symétriques, de cinq polynômes antisymétriques et de trente polynômes de symétrie intermédiaire. Ces nombres 10, 5, 30 sont obtenus en ajoutant les chiffres de chaque colonne.

Ayant exprimé les polynômes en coordonnées polaires nous devons déterminer la valeur des opérateurs en coordonnées polaires. Transformons les expressions déjà trouvées pour l'opérateur du deuxième ordre. Il suffit de calculer

$$D_{12} = \frac{2}{3}\left(X + \frac{1}{2}\right) = \frac{2}{3}\left(r\cos\varphi + \frac{1}{2}\right) \qquad (71)$$

$$\frac{\partial}{\partial n_{12}} = -\sqrt{3}\left(\sin\varphi\,\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}\cos\varphi\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)$$

car D_{31} et $\frac{\partial}{\partial n_{31}}$ s'obtiennent en remplaçant φ par $\varphi + \frac{2\pi}{3}$ et D_{23}

et $\frac{\partial}{\partial n_{23}}$ en remplaçant φ par $\varphi - \frac{2\pi}{3}$. La formation de Q ne nécessite que le calcul de l'expression

$$\frac{1}{2} D_{23} D_{31} \left(\frac{\partial F}{\partial n_{23}} \right)^2 = \frac{1}{24} (1 - r^2 - re^{i\varphi} - re^{-i\varphi} + r^2 e^{2i\varphi} + r^2 e^{-2i\varphi})$$

$$\times \left(\left(\frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} - i \frac{\partial F}{\partial r} \right) e^{i\varphi} + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} + i \frac{\partial F}{\partial r} \right) e^{-i\varphi} \right)^2 \tag{72}$$

Les deux autres termes s'en déduisent en changeant φ en $\varphi \pm \frac{2\pi}{3}$ et il faut ensuite sommer. Mais cette sommation est simple car

$$S e^{in\varphi} = \begin{cases} 3\, e^{in\varphi} & \text{si n est un multiple de 3} \\ 0 & \text{si n n'est pas multiple de 3} \end{cases}$$

Dans le développement de l'expression quadratique nous avons donc à retenir seulement les termes indépendants en $e^{3i\varphi}$ et en $e^{-3i\varphi}$ et à les multiplier par 3. Nous obtenons ainsi

$$Q_2 [F] = \frac{1}{4} \left\{ (1-2r^2) \left(\frac{\partial F}{\partial r} \right)^2 + \left(\frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right)^2 \right.$$

$$\left. - r \left[\left(\frac{1}{r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \right)^2 - \left(\frac{\partial F}{\partial r} \right)^2 \right] \cos 3\varphi - 2 \frac{\partial F}{\partial r} \frac{\partial F}{\partial \varphi} \sin 3\varphi \right\} \tag{73}$$

En multipliant par l'élément d'aire $r dr d\varphi$ et en appliquant la technique du calcul des variations, on passe sans difficultés à l'opérateur $K^{(2)}$

$$K^{(2)} = \frac{1}{2r} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left[r(1-2r^2 + r\cos 3\varphi) \frac{\partial}{\partial r} - r \sin 3\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right.$$

$$\left. + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left[- r \sin 3\varphi \frac{\partial}{\partial r} + \left(\frac{1}{r} - \cos 3\varphi \right) \frac{\partial}{\partial \varphi} \right] \right\} \tag{74}$$

Sous cette forme la recherche des valeurs propres est très simple : un polynôme F de degré N comprend comme termes de plus haut degré transformés en expression trigonométrique, $r^N e^{ip\varphi}$. La seule partie de $K^{(2)}$ qui, appliquée à F conserve le degré est :

$$- \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r^3 \frac{\partial}{\partial r}$$

Dans l'équation aux valeurs propres

$$K^{(2)} F = \lambda F$$

l'identification terme à terme n'est possible que si

$$-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} r^3 \frac{\partial}{\partial r} r^N e^{ip\varphi} = -\lambda r^N e^{ip\varphi} \qquad (75)$$

On en déduit la valeur propre déjà citée

$$\lambda = -N(N+2)$$

Il n'existe aucune relation entre les coefficients des termes de plus haut degré. Le rôle du second opérateur sera précisément d'en établir. Jusque là ces (N+1) coefficients sont indépendants ; la valeur propre λ est bien dégénérée d'ordre N+1.

Montrons plus en détail comment un polynôme se calcule quand on donne l'ensemble des termes de plus haut degré. On trouve pour l'action de $K^{(2)}$ sur le terme $r^p e^{iq\varphi}$

$$\begin{aligned} K^{(2)} r^p e^{iq\varphi} &= -p(p+2)\, r^p e^{iq\varphi} \\ &+ \frac{1}{4}(p-q)(p-q-2)\, r^{p-1} e^{i(q+3)\varphi} \\ &+ \frac{1}{4}(p+q)(p+q-2)\, r^{p-1} e^{i(q-3)\varphi} \qquad (76) \\ &+ \frac{1}{2}(p-q)(p+q)\, r^{p-2} e^{iq\varphi} \end{aligned}$$

Soit $\alpha_{p,q}$ le coefficient du terme en question dans le polynôme ; la formule de récurrence s'écrit

$$(N-p)(N+p+2)\,\alpha_{pq} + \frac{1}{4}(p-q+4)(p-q+2)\,\alpha_{p+1,q-3}$$

$$+ \frac{1}{4}(p+q+4)(p+q+2)\,\alpha_{p+1,q+3} + \frac{1}{2}(p+q+2)(p-q+2)\,\alpha_{p+2,q} = 0 \qquad (77)$$

Les coefficients des termes de plus haut degré sont notés α_{Nq}. A partir des α_{Nq} on détermine d'abord les $\alpha_{N-1,q}$, puis les $\alpha_{N-2,q}$ et ainsi de suite. Le problème de la détermination des polynômes F se trouve donc ramené à celui de la détermination des α_{Nq}.

Nous déterminerons $K'^{(4)}$ en coordonnées polaires en partant de $Q_4[F]$. Le calcul bien qu'un peu long ne présente pas de difficulté. On peut y mettre

en évidence trois expressions différentielles

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}$$

$$A = -\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \qquad (78)$$

$$B = 2\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}\right)$$

Dans la formation de $K'^{(4)}$ il faudra prendre soin de faire correspondre à un terme en $(\Delta F)^2$ de Q_4 un terme en $2\ \Delta^*\ \Delta F$ de K'_4, les opérations Δ^*, A^* et B^* étant définies par

$$\Delta^* = \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2}$$

$$A^* = \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{1}{r^2} \qquad (79)$$

$$B^* = \frac{-2}{r}\frac{\partial^2}{\partial r \partial \varphi}$$

Les valeurs propres de $K'^{(4)}$ sont calculées en considérant uniquement les termes qui ne changent pas le degré. En appliquant $K'^{(4)}$ à $r^N e^{iq\varphi}$ cette quantité devient

$$-\frac{1}{24}(N-q)(N-q-2)(N-q-4)(3N+q+6)\, r^N e^{i(q+6)\varphi}$$

$$+\frac{1}{12}(3N^2+6N-q^2)(3N^2+6N-q^2-8)\, r^N e^{iq\varphi} \qquad (80)$$

$$-\frac{1}{24}(N+q)(N+q-2)(N+q-4)(3N-q+6)\, r^N e^{i(q-6)\varphi}$$

Les autres termes donneraient des puissances inférieures de r et sont donc sans intérêt.

On peut simplifier l'expression ci-dessus en prenant $K^{(4)}_{\beta}$ au lieu de $K'^{(4)}$. Le terme du milieu se réduit alors à

$$\frac{1}{12} q^2 \left(q^2 - 6N^2 - 12N + 8\right) r^N e^{iq\varphi} \qquad (81)$$

Soit P un polynôme de degré N pris sous forme trigonométrique. En l'assujettissant à être fonction propre de $K^{(2)}$ on laisse indéterminés, comme nous l'avons vu plus haut, les coefficients des termes de plus haut degré. En faisant agir $K^{(4)}$ on obtient une relation de récurrence à trois termes et les huit formes que peuvent prendre les polynômes nous donneront huit cas différents. Il suffit pour obtenir les valeurs propres d'écrire dans chaque cas que le système linéaire est compatible.

Donnons l'exemple du cas N = 5. Il existe six polynômes indépendants appartenant à la valeur propre - 35 de $K^{(2)}$. La forme générale des termes de plus haut degré est pour les différentes symétries.

$$Q_5\left[3\right] = r^5 \cos 3\varphi \qquad Q_5\left[1^3\right] = r^5 \sin 3\varphi$$

$$Q_5\left[21\right] 1 = r^5 \left(\alpha_1 \cos \varphi + \alpha_5 \cos 5\varphi\right) \qquad (82)$$

$$Q_5\left[21\right] 2 = r^5 \left(\beta_1 \sin \varphi + \beta_5 \sin 5\varphi\right)$$

Les systèmes linéaires qui déterminent à la fois les coefficients et les valeurs propres λ de $K^{(4)}$ sont :

$$\left.\begin{aligned} \left(\lambda + \frac{67}{4}\right)\alpha_1 + 320\,\alpha_5 &= 0 \\ 40\,\alpha_1 + \left(\frac{1475}{4} + \lambda\right)\alpha_5 &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \begin{aligned} \lambda_1 &= -\frac{3}{4}\left(257 + 64\sqrt{19}\right) \\ \lambda_2 &= -\frac{3}{4}\left(257 - 64\sqrt{19}\right) \end{aligned} \qquad (83)$$

$$\left.\begin{aligned} \left(\lambda + \frac{67}{4}\right)\beta_1 - 320\,\beta_5 &= 0 \\ -40\,\beta_1 + \left(\frac{1475}{4} + \lambda\right)\beta_5 &= 0 \end{aligned}\right\} \qquad \begin{aligned} \lambda_3 &= \lambda_1 \\ \lambda_4 &= \lambda_2 \end{aligned}$$

CHAPITRE V

IMPORTANCE DES SYMÉTRIES DANS LE CALCUL DE L'ETAT FONDAMENTAL DU TRITON

Nous disposons maintenant de fonctions simples qui possèdent les diverses symétries du groupe symétrique de degré trois. Nous allons utiliser quelques une de ces fonctions pour étudier l'importance des symétries dans le calcul du niveau fondamental du triton et de l'énergie coulombienne de H_e^3 . Les calculs numériques se compliquent avec le potentiel. Nous utiliserons pour faire cette étude un potentiel relativement simple. Il ne comporte pas de forces tensorielles : l'état fondamental est alors un état S ; il est sans cœur dur : le domaine de variations est relativement simple ; mais il possède des termes d'échange ce qui permet de coupler entre elles les fonctions des diverses symétries.

Nous donnons d'abord la forme du potentiel nucléaire et les équations différentielles qui lient les fonctions radiales. Nous exprimons ensuite l'opérateur énergie cinétique en fonction des variables utilisées. Nous donnons enfin les méthodes numériques utilisées et les résultats obtenus.

V - 1 - POTENTIEL NUCLEAIRE UTILISE.

Le potentiel nucléaire que nous utilisons a déjà été adopté par KIKUTA MORITA et YAMADA [133] . Il est de la forme

$$V_{ij}(r_{ij}) = \frac{1}{4}(3 + \sigma_i \sigma_j) V_t(r_{ij}) + \frac{1}{4}(1 - \sigma_i \sigma_j) V_s(r_{ij}) \qquad (1)$$

où σ_i est l'opérateur de spin habituel

$$V_t(r_{ij}) = - A_t e^{-\alpha_t r_{ij}} \qquad V_s = - A_s e^{-\alpha_s r_{ij}} \qquad (2)$$

Les valeurs des différentes constantes sont

$A_t = 192$ Mev $\qquad A_s = 109$ Mev

$\alpha_t = 15\ 10^{+12}\ cm^{-1}$ $\qquad \alpha_s = 14\ 10^{12}\ cm^{-1}$

Le potentiel total peut s'écrire en tenant compte des opérateurs de permutation des variables de spin $P^{\sigma}_{ij} = 1 + \frac{\sigma_i \sigma_j}{2}$ et

en notant $V(r_{ij}) \equiv V(ij)$

$$V = V_{12} + V_{23} + V_{31}$$

$$V = \frac{1}{2}\left[V_t(12) + V_s(12) + V_t(23) + V_s(23) + V_t(31) + V_s(31)\right] \qquad (3)$$

$$+ \frac{1}{2}\left[V_t(12) - V_s(12)\right] P^{\sigma}_{12} + \frac{1}{2}\left[V_t(23) - V_s(23)\right] P^{\sigma}_{23}$$

$$+ \frac{1}{2}\left[V_t(31) - V_s(31)\right] P^{\sigma}_{31}$$

V - 2 - FONCTION D'ONDE - EQUATIONS DIFFERENTIELLES

Le potentiel que nous avons adopté est uniquement central, l'état fondamental du triton est donc un état S. La fonction d'onde entièrement antisymétrique contenant des fonctions des variables d'espace ψ et les fonctions de spin-charge ξ sera de la forme donnée au chapitre III

$$\psi[1^3] = \psi[1^3]\,\xi[3] - \psi[3]\,\xi[1^3] + \psi[21]_2\,\xi[21]_1 - \psi[21]_1\,\xi[21]_2 \qquad (4)$$

L'action des opérateurs P^{σ}_{ij} sur les fonctions de spin charge fait apparaître certaines combinaisons des fonctions qui figurent dans le potentiel.

$$V[3] = \frac{1}{2}\left[V_t(12) + V_s(12) + V_t(23) + V_s(23) + V_t(31) + V_s(31)\right] \qquad (5)$$

$$V[21]_1 = \frac{1}{2}\left\{-\left[V_t(12) - V_s(12)\right] + \frac{1}{2}\left[V_t(23) - V_s(23) + V_t(31) - V_s(31)\right]\right\}$$

$$V[21]_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}\left\{\frac{1}{2}\left[V_t(23) - V_s(23)\right] - \frac{1}{2}\left[V_t(31) - V_s(31)\right]\right\}$$

Les différentes fonctions des variables d'espace sont solutions du système d'équations différentielles suivantes où T est l'opérateur énergie cinétique de l'équation de SCHRÖDINGER

$$(T-E)\ \psi[1^3] = -V[3]\ \psi[1^3] - V[21]1\ \psi[21]2 + V[21]2\ \psi[21]1$$

$$(T-E)\ \psi[3] = -V[3]\ \psi[3] - V[21]1\ \psi[21]1 - V[21]2\ \psi[21]2$$

$$(T-E)\ \psi[21]1 = -V[3]\ \psi[21]1 - V[21]1\ \psi[3] + V[21]2\ \psi[1^3] \qquad (6)$$

$$(T-E)\ \psi[21]2 = -V[3]\ \psi[21]2 - V[21]1\ \psi[1^3] - V[21]2\ \psi[3]$$

Le couplage des diverses fonctions radiales est dû à la présence de termes d'échange dans le potentiel nucléaire

V - 3 - OPERATEUR ENERGIE CINETIQUE

Dans l'état S, l'opérateur T ne dépend que des 3 variables r_{12}, r_{23} et r_{31}.

$$T = -\frac{\hbar^2}{m}\sum_{\text{(permutations circulaires)}} \frac{\partial^2}{\partial r_{12}^2} + \frac{2}{r_{12}} \times \frac{\partial}{\partial r_{12}} + \frac{r_{12}^2 + r_{23}^2 - r_{31}^2}{2 r_{12} r_{23}} \times \frac{\partial^2}{\partial r_{12}\,\partial r_{23}} \qquad (7)$$

Quand nous faisons les différents changements de variables envisagés au chapitre IV nous faisons intervenir dans T des opérateurs et des polynômes de différents symétries. Nous donnons ci-dessous les valeurs dans les systèmes de variables les plus intéressants.

Le seul opérateur du 2° ordre qui intervienne est l'opérateur $K^{(2)}$. Les 2 opérateurs du 1° ordre que nous trouvons sont

$$O[21]1 = -\frac{1}{3}\left(\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial X} = \cos\varphi\ \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin\varphi}{r} \times \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

$$O[21]2 = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(\frac{\partial}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial y}\right) = \frac{\partial}{\partial Y} = \sin\varphi\ \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos\varphi}{r} \times \frac{\partial}{\partial \varphi} \qquad (8)$$

Les polynômes que nous trouvons le plus souvent sont

$Q_o[3] = 1$

$$Q_1\,[21]\,1 \quad = 1 - \frac{3}{2}\,(x+y) \;=\; X = r\cos\varphi$$

$$Q_1\,[21]\,2 \quad = \frac{\sqrt{3}}{2}\,(x-y) \;=\; Y = r\sin\varphi$$

$$Q_2\,[3] \quad = 1 - 3x - 3y + 3x^2 + 3y^2 + 3xy = X^2 + Y^2 = r^2$$

$$Q_2\,[21]\,1 \quad = 1 - 3x - 3y + \frac{3x^2}{2} + \frac{3y^2}{2} + 4xy = X^2 - Y^2 = r^2\cos 2\varphi$$

$$Q_2\,[21]\,2 \quad = -\sqrt{3}\left[x - y - \frac{3x^2}{2} + \frac{3y^2}{2}\right] = -2XY = -r^2\sin 2\varphi$$

$$Q_3\,[3] \quad = X^3 - 3XY^2 = r^3\cos 3\varphi \qquad (9)$$

$$Q_3\,[1^3] \quad = 3X^2Y - Y^3 = r^3\sin 3\varphi$$

$$Q_3\,[21]\,1 \quad = X(X^2 + Y^2) = r^3\cos\varphi$$

$$Q_3\,[21]\,2 \quad = Y(X^2 + Y^2) = r^3\sin\varphi$$

Les combinaisons de ces quantités qui apparaissent dans T sont

$$a\,[3] \quad = \frac{2}{3}\left(Q_0\,[3] - Q_2\,[3]\right)$$

$$b\,[3] \quad = \frac{2}{27}\left(4Q_0\,[3] - 3Q_2\,[3] - Q_3\,[3]\right)$$

$$A\,[3] \quad = 2 + a\,[3] + 2\,G\,[3]$$

$$B\,[3] \quad = 4\,G\,[3] + 2\left(2 - a\,[3]\right)K^{(2)}\,[3] \qquad (10)$$

$$G\,[3] \quad = \frac{1}{3}\left(-Q_1\,[21]\,1 - Q_2\,[21]\,1 + 2Q_3\,[21]\,1\right) \circ [21]\,1$$

$$+ \frac{1}{3}\left(-Q_1\,[21]\,2 - Q_2\,[21]\,2 + 2Q_3\,[21]\,2\right) \circ [21]\,2$$

Alors

$$T = -\frac{\hbar^2}{m}\,\frac{1}{s^2\,b\,[3]}\left(2s^2\,a\,[3]\,\frac{\partial^2}{\partial s^2} + 2s\,A\,[3]\,\frac{\partial}{\partial s} + B\,[3]\right) \qquad (11)$$

soit directement en fonction des variables s r et φ

$$T = -\frac{4}{3}\frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{s^2 b}\left\{ s^2(1-r^2)\frac{\partial^2}{\partial s^2} + s(4-r^2)\frac{\partial}{\partial s}\right.$$

$$\left. + \left[(2r^3 - r^2\cos 3\varphi - r)\frac{\partial}{\partial r} + r\sin 3\varphi \times \frac{\partial}{\partial \varphi}\right](1 + s\frac{\partial}{\partial s}) + (2+r^2)K^{(2)}\right\} \qquad (12)$$

V - 4 METHODES DE CALCUL NUMERIQUE

Nous déterminerons le niveau fondamental du triton en utilisant la méthode de variation par rapport aux paramètres introduits dans la fonction qui approche la fonction d'onde :

$$E < \Psi \mid \Psi > = < \Psi \mid T + V \mid \Psi >$$

Les fonctions de spin-charge étant orthogonales, en n'utilisant que des fonctions d'essai réelles la relation précédente nous donne

$$E \sum_{\text{symétries i}} \langle \Psi_{[i]} \mid \Psi_{[i]} \rangle = \sum_{\text{symétries i}} \langle \Psi_{[i]} \mid T + U_{[3]} \mid \Psi_{[i]} \rangle$$

$$+ 2\langle \Psi_{[1^3]} \mid V_{[21]\,1} \mid \Psi_{[21]\,2} \rangle - 2\langle \Psi_{[1^3]} \mid V_{[21]\,2} \mid \Psi_{[21]\,1} \rangle$$

$$+ 2\langle \Psi_{[3]} \mid V_{[21]\,2} \mid \Psi_{[21]\,2} \rangle + 2\langle \Psi_{[3]} \mid V_{[21]\,1} \mid \Psi_{[21]\,1} \rangle$$

En employant des fonctions d'onde de la forme (13)

$$\Psi_{[i]} = \sum a_{pmn}\, e^{-\lambda s}\, s^p\, r^m \cos n\varphi \qquad (14)$$

nous ajusterons les paramètres λ et a_{pmn}
Nous ferons intervenir dans les calculs de la norme et de l'énergie cinétique les intégrales

$$(l, m) = \iint_{T_2} r^l \cos m\varphi \; r\, dr\, d\varphi \qquad (15)$$

T_2 est le triangle déjà défini au paragraphe 1 du chapitre IV
Nous donnons en appendice VI la méthode pour calculer ces intégrales ainsi que la valeur numérique des premières intégrales.

Les éléments de matrice de la norme et de l'énergie cinétique pour 2 fonctions

$$f = s^{\alpha} r^{\beta} \cos \gamma \varphi \, e^{-\lambda s} \quad \text{et} \quad f' = S^{\alpha'} r^{\beta'} \cos \gamma' \varphi \, e^{-\lambda s} \tag{16}$$

où α, α', β, β', γ et γ' sont des entiers, se calculent aisément à l'aide des intégrales (l,m)

Les éléments de matrices du potentiel sont calculés à partir des intégrales

$$(A\,AC \mid l\,mn) = \iiint \xi^{l} \eta^{m} \zeta^{n} \, e^{-A\xi - A\eta - C\zeta} \, dV$$

$$\text{et } (A'\,A'\,C \mid l\,m\,n) = \iiint \xi^{l} \eta^{m} \zeta^{n} \, e^{-A'\xi - A'\eta - C\zeta} \, dV \tag{17}$$

avec $A = 2\lambda + \frac{\alpha_t}{2}$ $\qquad C = 2\lambda$ $\qquad A' = 2\lambda + \frac{\alpha_s}{2}$

V - 5 - IMPORTANCE DES SYMETRIES DANS LE CALCUL DU NIVEAU FONDAMENTAL

En utilisant le potentiel sans cœur dur du paragraphe 1, KIKUTA MORITA [133] ont déterminé le niveau fondamental du triton en utilisant comme fonction d'onde

$$\psi[3] = e^{-\lambda s} \tag{18}$$

Ils donnent pour ce niveau fondamental

$E_1 = -10,26$ Mev $\qquad$ avec $2\lambda = 0,9574 \quad 10^{13}$ cm^{-1}

En prenant une fonction d'onde entièrement symétrique plus élaborée du genre

$$\psi[3] = e^{-\lambda s} + \alpha_1 \, s \, e^{-\lambda s} \tag{19}$$

$$\text{ou} \quad \psi[3] = e^{-\lambda s} + \alpha_1 \, e^{-2\lambda s}$$

et en faisant varier les paramètres λ et α_1 on n'obtient pas une amélioration sensible (inférieure à 1 %) du niveau fondamental.

Pour déterminer l'influence de la symétrie intermédiaire sur le niveau fondamental nous avons choisi comme fonctions des variables radiales

$$\psi\,[3] \;=\; e^{-\lambda s}$$

$$\psi\,[21]\;1 \;=\; c_1\, e^{-\lambda s}\; s\, r\, \cos\varphi \qquad (20)$$

$$\psi[21]\;2 \;=\; c_1\, e^{-\lambda s}\; s\, r \sin\varphi$$

Le minimum de l'énergie est encore donné par

$2\lambda = 0{,}9574\;\; 10^{13}\ \mathrm{cm}^{-1}$ mais alors

$$E_2 = -\,10{,}88\ \mathrm{Mev} \qquad (c_1 = -\,4\ 10^{\prime\prime})$$

Le niveau a baissé d'à peu près 6 %

L'introduction de la fonction antisymétrique

$$\psi[1^3] \;=\; C_2\; e^{-\lambda s}\; s^3\; r^3 \sin 3\varphi \qquad (21)$$

ne modifie ce niveau que de 0,4 %. C'est pratiquement négligeable devant l'influence de la symétrie intermédiaire.

V - 6 - IMPORTANCE DES SYMETRIES DANS LE CALCUL DE L'ENERGIE COULOMBIENNE DE He^3

L'opérateur T_3 de charge agit sur les 2 états de charge d'un nucléon. Si $\tilde{\omega}$ représente l'état de charge proton d'un nucléon et si ν représente l'état de charge neutron

$$T_3\;\tilde{\omega} = \tfrac{1}{2}\,\tilde{\omega} \qquad T_3\,\nu = -\,\tfrac{1}{2}\,\nu \qquad (22)$$

L'opérateur $\Pi_\omega = \tfrac{1}{2}(1 + 2\,T_3)$ (23)

agit d'une manière sélective sur les états protons et neutrons

$$\Pi_\omega\;\tilde{\omega} = \tilde{\omega} \qquad (24)$$

$$\Pi\omega\;\nu = 0$$

L'énergie potentielle de Coulomb d'un noyau peut se mettre sous la forme

$$\hat{V}_{pp} = \sum_{i<j\leq N} V^{ij}_{p.p}\,\Pi_{\omega\,i}\;\Pi_{\omega_j} \qquad (25)$$

$$\text{avec} \quad V_{pp}^{ij} = \frac{e^2}{r_{ij}}$$

En traitant $\hat{V}_{pp}$ comme une perturbation de l'état fondamental du triton, l'état fondamental de He^3 diffère de l'état fondamental du triton de la valeur

$$E_c = \frac{\langle \Psi | V_{pp} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \qquad (26)$$

Les valeurs moyennes des opérateurs de charge $\prod \omega_i \prod \omega_j$ prises sur les fonctions de spin-charge de He^3 sont simples à calculer. En n'utilisant que les variables radiales , E_c est donné par la relation

$$E_c \left(\langle \psi[3] \mid \psi[3] \rangle + \langle \psi[1^3] \mid \psi[1^3] \rangle + \langle \psi[21]\ 1 \mid \psi[21]\ 1 \rangle + \langle \psi[21]\ 2 \mid \psi[21]\ 2 \rangle \right) =$$

$$\frac{e^2}{3} \left(\langle \psi[3] \mid \sum \frac{1}{r_{ij}} \mid \psi[3] \rangle + \langle \psi[1^3] \mid \sum \frac{1}{r_{ij}} \mid \psi[1^3] \rangle + \right.$$

$$\langle \psi[21]\ 1 \mid \sum \frac{1}{r_{ij}} \mid \psi[21]\ 1 \rangle + \langle \psi[21]\ 2 \mid \sum \frac{1}{r_{ij}} \mid \psi[21]\ 2 \rangle$$

$$+ \langle \psi[1^3] \mid \frac{1}{r_{13}} + \frac{1}{r_{23}} - \frac{2}{r_{12}} \mid \psi[21]\ 2 \rangle + \sqrt{3} \langle \psi[1^3] \mid \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \mid \psi[21]\ 1 \rangle$$

$$+ \langle \psi[3] \mid \frac{2}{r_{12}} - \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \mid \psi[21]\ 1 \rangle + \sqrt{3} \langle \psi[3] \mid \frac{1}{r_{13}} - \frac{1}{r_{23}} \mid \psi[21]\ 2 \rangle \Big)$$

La fonction entièrement symétrique $e^{-\lambda S}$ seule donne (27)

$$E_c = 0{,}925 \text{ Mev}$$

tandis que l'ensemble fonction symétrique + symétrie intermédiaire donne

$$E_c = 0{,}917 \text{ Mev}$$

soit une amélioration de près de 7 %

CHAPITRE VI

FONCTIONS D'ONDE APPROCHÉES DE SYMÉTRIE DÉFINIE POUR L'ETAT FONDAMENTAL DE L'ATOME DE LITHIUM

Nous nous attachons, dans ce chapitre, à l'étude des symétries de la fonction d'onde de l'état fondamental de l'atome de lithium et au calcul numérique de l'énergie de cet état en utilisant les fonctions de base du chapitre IV et les opérateurs du chapitre II.

Dans le premier paragraphe nous rappelons que les fonctions des variables d'espace de l'état fondamental doivent posséder la symétrie intermédiaire.

Dans le deuxième nous utilisons les fonctions de base du chapitre IV pour approcher les fonctions des variables d'espace de l'état fondamental. L'énergie de cet état est déterminée par la méthode de variation. Malheureusement, lorsque le nombre de paramètres utilisés dans la fonction approchée est trop restreint, on ne décrit pas d'une manière assez exacte une configuration $1s^2\ 2s$.

Le troisième paragraphe utilise une autre méthode pour décrire la configuration $1s^2\ 2s$. On emploie des propriétés des fonctions des diverses symétries étudiées au chapitre II.

VI - 1 - SYMETRIES DES FONCTIONS D'ONDE

L'atome de lithium est formé d'un noyau de charge électrique $Z = 3$ et de trois electrons.

Nous savons [13 5] que les fonctions de spin d'un système composé de trois électrons peuvent appartenir à l'état doublet ou à l'état quadruplet. Les fonctions de l'état doublet possèdent la symétrie intermédiaire. Nous les notons de la manière suivante

$$^2\chi\,([21]\,\nu \quad Sz) \qquad \nu = 1,2 \qquad Sz := -\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \qquad (1)$$

Les fonctions de l'état quadruplet sont entièrement symétriques

$$^4\chi\,([3]\,;\quad Sz) \qquad Sz = -\frac{3}{2}\,,\; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2} \qquad (2)$$

Dans cette étude, nous pouvons supposer que le noyau de l'atome de lithium est fixé à l'origine des axes et que le hamiltonien ne dépend pas du spin des trois électrons.

La fonction d'onde complètement antisymétrique de l'état doublet sera de la forme

$$^2\psi([1^3]) = {}^2\chi\,([21]\,2, Sz)\,\psi[21]\,2 - {}^2\chi\,[21]\,1, Sz)\,\psi[21]\,1 \qquad (3)$$

Les fonctions ψ dépendent des variables d'espace des trois électrons En portant ψ dans l'équation de SCHRODINGER

$$H\,{}^2\psi = {}^2E\,{}^2\psi$$

nous obtenons les équations

$$H\,\psi[21]\,1 = {}^2E\,\psi[21]\,1 \qquad H\,\psi[21]\,2 = {}^2E\,\psi[21]\,2 \qquad (4)$$

L'énergie est dégénérée d'ordre deux. Une combinaison linéaire des fonctions $\psi[21]\,1$ et $\psi[21]\,2$ est également solution des équations appartenant à la même valeur propre ^2E

La fonction d'onde antisymétrique de l'état quadruplet sera de la forme

$$^4\psi[1^3] = {}^4\chi([3]\,,\, Sz)\;\psi\;[1^3] \qquad (5)$$

La fonction des variables d'espace est solution de l'équation

$$H\,\psi\,[1^3] = {}^4E \quad \psi\;[1^3]$$

Les fonctions des variables d'espace de l'état fondamental de l'atome de lithium possèdent la symétrie intermédiaire. En effet si nous traitons les interactions coulombiennes entre electrons comme une perturbation, la fonc-

tion d'onde d'ordre zéro est constituée par une combinaison de produits de fonctions hydrogénoïdes. Dans cet état, le lithium est formé de trois électrons dans la configuration $1s^2\ 2s$

Pour former les combinaisons des différentes symétries nous partons du produit de fonctions hydrogénoïdes $\psi_{1mn}(r_i)$ qui représentent la configuration $1s^2\ 2s$

$$\psi_{100}^{(1)} \times \psi_{100}^{(2)} \times \psi_{200}^{(3)}$$

Les différentes fonctions que l'on peut former à partir du produit ci-dessus sont données dans le chapitre II. Certaines sont nulles car $\psi(1)$ à la même forme que $\psi(2)$. Nous obtenons une fonction entièrement symétrique et deux fonctions de symétrie intermédiaire.

$$\Psi[3] = \psi_{100}^{(1)} \times \psi_{100}^{(2)} \times \psi_{200}^{(3)} + \psi_{100}^{(1)}\psi_{100}^{(3)}\psi_{200}^{(2)} + \psi_{100}^{(3)}\psi_{100}^{(2)}\psi_{200}^{(1)}$$

$$\Psi[21]\ 1 = \psi_{100}^{(1)}\psi_{100}^{(2)}\psi_{200}^{(3)} - \tfrac{1}{2}\psi_{100}^{(1)}\psi_{100}^{(3)}\psi_{200}^{(2)} - \tfrac{1}{2}\psi_{100}^{(3)}\psi_{100}^{(2)}\psi_{200}^{(1)}$$

$$\Psi[21]\ 2 = \frac{\sqrt{3}}{2}\left[\psi_{100}^{(1)}\psi_{100}^{(3)}\psi_{200}^{(2)} - \psi_{100}^{(3)}\psi_{100}^{(2)}\psi_{200}^{(1)}\right] \qquad (6)$$

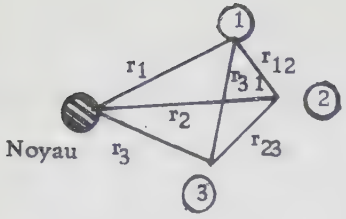
$$\Psi[1^3] = 0$$

L'état fondamental est donc un état doublet. Les fonctions des variables d'espace possèdent la symétrie intermédiaire.

VI - 2 - DEVELOPPEMENT OU FIGURENT LES VARIABLES S, r et φ

Nous avons construit, au chapitre IV, des expressions en S, r et φ qui possèdent des symétries bien déterminées. Nous allons les utiliser pour former la fonction des variables radiales de l'état fondamental.

a) Variables utilisées — En fixant le noyau de l'atome à l'origine



des axes, nous avons besoin de neuf coordonnées pour repérer le tétraèdre formé par le noyau et les trois électrons.

Nous pouvons séparer ces coordonnées en deux groupes d'abord trois angles d'EULER qui orientent le tétraèdre dans l'espace, puis six variables qui donnent la forme du tétraèdre.

L'état fondamental, qui est un état S, ne dépend pas des angles d'EULER. Le choix le plus intéressant des six autres variables est celui des six variables radiales r_1, r_2, r_3, r_{12}, r_{23} et r_{31}, qui fixent les distances des électrons au noyau et des électrons entre eux. Malheureusement l'élément de volume se présente sous une forme peu maniable pour le calcul des intégrales que l'on doit évaluer dans la méthode de variation.

On peut essayer de remédier à ce désavantage en exprimant les r_{ij} en fonction des angles θ_{ij} que font entre eux les vecteurs $\vec{r}_i$ et $\vec{r}_j$

$$r_{ij}^2 = r_i^2 + r_j^2 - 2\, r_i \cdot r_j \quad \text{Cos } \theta_{ij} \qquad (7)$$

Cos θ_{ij} s'exprime en fonction des angles polaires θ_i, φ_i, θ_j, φ_j des vecteurs $\vec{r}_i$ et $\vec{r}_j$ par l'intermédiaire d'un polynôme de Legendre P_l et des fonctions sphériques Y_{lm}

Les puissances de cos θ_{ij} sont connues à l'aide de polynômes de Legendre P_l et des fonctions sphériques Y_{lm}.

$$P_l\left(\cos\theta_{ij}\right) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}^{*}\left(\theta_i, \varphi_i\right) Y_{lm}\left(\theta_j, \varphi_j\right) \qquad (8)$$

L'élément de volume s'écrit

$$d\tau = \prod_{i=1}^{3} r_i^2 \, dr_i \sin\theta_i \, d\theta_i \, d\varphi_i$$

Nous pourrons donc choisir des fonctions où figurent les variables r_i et r_{ij} et les intégrations seront faites à l'aide des variables r_i , θ_i, φ_i.

Pour utiliser les polynômes étudiés au chapitre IV combinons les variables radiales pour aboutir aux variables suivantes

$$\lambda (r_1 + r_2 + r_3) = S$$

$$\lambda r_1 = S \left(- \frac{1}{3} r \cos \varphi + \frac{1}{\sqrt{3}} r \sin \varphi + \frac{1}{3} \right) \quad (9)$$

$$\lambda r_2 = S \left(- \frac{1}{3} r \cos \varphi - \frac{1}{\sqrt{3}} r \sin \varphi + \frac{1}{3} \right)$$

$$\lambda r_{ij} = \rho_{ij} \quad , \quad \lambda r_i = \rho_i$$

Le nombre λ est un paramètre que nous définirons dans la suite. Les variables r et φ prennent leurs valeurs dans le triangle T_2 dont les sommets sont les points (1,0), $(-\frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ et $(-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2})$

Nous multiplions l'élément de volume d τ par un facteur $3 \frac{15}{2} \lambda^{9/2}$ de façon à simplifier la présentation du nouvel élément de volume d V en fonction de variables S, r et φ

$$d V = \left(\frac{3}{2}\right)^{\frac{15}{2}} \lambda^9 \, d\tau \quad (10)$$

$$d V = s^8 \, d s \, (1 - 3 r^2 + 2 r^3 \cos 3 \varphi)^2 \, r dr \, d\varphi \prod_1^3 \sin \theta_i \, d \theta_i \, d \varphi_i$$

b) Forme de la fonction d'onde

Pour former la fonction d'onde nous allons combiner des produits de fonctions des variables S, r et φ et des variables ρ_{ij}.

Nous avons construit au chapitre IV des fonctions de la forme $s^l r^m \cos n \varphi$ qui possèdent la symétrie $[\nu] \nu$. Nous les désignons par $R ([\nu] \nu , l m n)$ En utilisant les relations établies au chapitre II nous pouvons former des fonctions des diverses symétries en partant du produit

$$(\rho_{12})^i \times (\rho_{23})^j \times (\rho_{31})^k$$

Nous désignons ces fonctions par $P([\nu]\nu \quad , ijk)$

Utilisons les propriétés des produits de deux représentations pour former une fonction d'onde de symétrie intermédiaire en combinant des produits R.P

Un facteur exponentiel permettra à la fonction d'onde de tendre vers zéro pour s grand. Ayant introduit un paramètre dans le changement de variable ce facteur sera choisi de manière simple : $\exp -\frac{s}{2}$ La fonction d'onde s'exprimera sous la forme

$$\Phi[21]\,1 = e^{-\frac{s}{2}} \left\{ \sum_{ijklmn} A^{ijk}_{lmn} \; P\left([3], ijk\right) R\left([21]\,1, lmn\right) \right. \tag{11}$$

$$+ B^{ijk}_{lmn} \; P\left([1^3], ijk\right) \; R\left([21]\,2, lmn\right)$$

$$\left. + C^{ijk}_{lmn} \left(P\left([21]\,2, ijk\right) R\left([21]\,2, lmn\right) - P\left([21]\,1, ijk\right) R\left([21]\,1, lmn\right) \right) \right\}$$

Les grandeurs A B C sont des coefficients numériques que l'on ajustera par la méthode de variation

c) Hamiltonien

En supposant le noyau infiniment lourd fixé à l'origine des axes, le hamiltonien de l'atome d'hélium s'écrit, en adoptant les unités atomiques.

$$H = -\frac{1}{2}\left(\Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3\right) - Z\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_3}\right) + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{23}} + \frac{1}{r_{31}} \tag{12}$$

Pour faciliter le calcul des éléments de matrices, nous le décomposons en plusieurs opérateurs

$$H = -\frac{1}{2}\lambda^2 H'_1 + \frac{1}{2}\lambda^2 H'_2 - Z\lambda H'_3 + \lambda H'_4$$

$$H'_1 = \sum_i \frac{\partial^2}{\partial \rho_i^2} + \frac{2}{\rho_i} \times \frac{\partial}{\partial \rho_i}$$

$$H'_2 = \sum_i \frac{\vec{L}_i^2}{\rho_i^2} \qquad (H'_2 = 0 \text{ dans l'état S})$$

$$H_3' = \sum_i \frac{1}{\rho_i} \qquad (13)$$

$$H_4' = \sum_{i>j} \frac{1}{\rho_{ij}}$$

ou nous avons posé $\lambda r_i = \rho_i \qquad \lambda r_{ij} = \rho_{ij}$

$\vec{L}_i$ est l'opérateur moment orbital $\vec{r}_i \wedge \vec{p}_i$

Les opérateurs H_1' et H_3' s'expriment en fonction des variables S r et φ

$$H_1' = 3\left\{ \frac{\partial^2}{\partial S^2} + \frac{6}{S}\frac{\partial}{\partial S} - \frac{2r}{S}\frac{\partial^2}{\partial S \partial r} \frac{1}{S^2}\left(r^2 + \frac{1}{2}\right)\frac{\partial 2}{\partial r^2} + \frac{1}{2S^2 r^2}\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right.$$

$$\left. + \frac{1}{S^2 r}\left(\frac{1}{2} - 4r^2\right)\frac{\partial}{\partial r} \right.$$

$$+ \frac{6r}{1-3r^2+2r^3\cos 3\varphi}\left[\frac{2r}{S}\left(1 - r\cos 3\varphi\right)\frac{\partial}{\partial S} - \frac{2}{S^2}\left(r^2 + \frac{1}{2}\right) \right.$$

$$\left. \left(1 - r\cos 3\varphi\right)\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{S^2}\sin 3\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right\}$$

(14)

$$H_3' = \frac{9}{S} \quad \frac{1-r^2}{1-3r^2+2r^3\cos 3\varphi}$$

d - Energie de l'état fondamental

Faisons d'abord un changement de paramètre, pour l'énergie de liaison, qui généralise des changements déjà réalisés dans les problèmes à un et à deux électrons.

Dans l'étude des atomes à un électron la fonction radiale se comporte, à l'infini, comme exp $(-\frac{\lambda}{2} r)$. On fait le changement suivant pour l'énergie

$$E = -1/8 \quad \lambda^2$$

Pour les atomes à deux électrons la fonction des variables radiales est équivalente pour r_i et r_{ij} très grands à $\exp\left[-\frac{\lambda}{2}(r_1 + r_2)\right]$

Quand on a en vue une résolution par identification il est avantageux de poser

$$E = -2/8 \quad \lambda^2 = -\frac{\lambda^2}{4}$$

Le lithium possédant trois électrons nous relierons l'énergie au paramètre λ par la relation

$$E = -3/8 \quad \lambda^2 \qquad (15)$$

L'équation de SCHRÖDINGER devient une équation homogène en ψ

$$\left[\lambda\left(-H_1 + \frac{3}{4}\right) - \left(2Z\,H_3' - 2H_4'\right)\right]\psi = 0$$

Que nous écrivons sous la forme

$$\left[\lambda A - B\right]\psi = 0 \qquad (16)$$

Les opérateurs A et B sont indépendants de λ La résolution numérique peut être faite à partir de là, à un ordre d'approximation donné par le nombre de fonctions ψ_i de symétrie définie que l'on utilise pour approcher ψ

On obtient un système linéaire algébrique dont les inconnues sont les fonctions ψ_i, la valeur de λ est donnée par la plus grande racine du déterminant.

$$\psi = \sum a_i \psi_i \qquad (17)$$

ψ_i désigne une des combinaisons $\exp(-\frac{S}{2})$ P. R que nous avons sélectionnées ci-dessus. Le coefficient a_i tient lieu d'un des coefficients

$$A^{ijk}_{lmn}, \quad B^{ijk}_{lmn} \quad \text{ou} \quad C^{ijk}_{lmn}$$

Le système linéaire est de la forme

$$\sum_i a_i \left(A_{ij}\lambda - B_{ij}\right) = 0$$

ou $A_{ij} = \langle \psi_i | A | \psi_j \rangle$

$$B_{ij} = \langle \varphi_i | B | \varphi_j \rangle \qquad (18)$$

La valeur de λ qui nous donne l'énergie de liaison est la plus grande racine positive du déterminant

$$| A_{ij} \lambda - B_{ij} | = 0 \qquad (19)$$

Cette méthode de résolution de l'équation de SCHRODINGER est équivalente à la méthode de variation [410]

Dans le tableau ci-dessous figurent les résultats des premiers essais.

Ordre de l'approximation	Coefficient de $e^{-\frac{s}{2}} S r \cos\varphi$	Coefficient de $e^{-\frac{s}{2}} S^2 r^2 \cos 2\varphi$	Coefficient de $e^{-\frac{s}{2}} [2\rho_{12}^2 - \rho_{13}^2 - \rho_{23}^2]$	λ	Etat fondamental E (en u;a.)
1°	1	0	0	4,09	- 6,27
2°	1	0,15	0	4,26	- 6,82
2°	1	0	$2,40.10^{-2}$	4,25	- 6,79
3°	1	0,11	$2,44.10^{-2}$	4,37	- 7,16

e - Critique des résultats

Nous reproduisons ci-dessous un tableau donné par WALSH et BOROWITZ [508] qui compare les diverses énergies calculées par la méthode de variation à partir des fonctions hydrogénoïdes

Nombre de paramètres	Energie en u. a.	Auteurs donnant ces résultats
0	- 7,05	WILSON [501]
1	- 7,28	WILSON [501]
2	- 7,39	WILSON [501]
3	- 7,41	WILSON [501]
7	- 7,45	HUANG [502]
Expérimentale	- 7,478	

Nous voyons que les résultats obtenus à l'aide de nos premières approximations sont bien moins bons que les résultats précédents. Nous pouvons attribuer cela à deux causes.

La méthode de calcul utilisée dans les travaux précédents n'impose pas de relation entre E et λ

Pour avoir une idée de la différence obtenue dans le calcul du niveau fondamental nous avons appliqué la méthode de variation à la fonction d'onde

$$\varphi = e - \frac{s}{2} \; S \; r \cos \varphi$$

et nous avons fait varier le paramètre λ
La valeur de λ qui rend l'énergie minimum est $\lambda = 3,46$ alors $E = -6,49$ u. a.

L'amélioration est sensible, cependant nous ne rejoignons pas encore les résultats déjà publiés.

On peut attribuer ensuite le relèvement du niveau de l'état fondamental au fait que l'exponentielle $\exp\left[-\frac{\lambda}{2}(r_1 + r_2 + r_3)\right]$ traduit très mal la configuration $1s^2\ 2s$ de l'état fondamental.

Cette configuration est décrite plutôt par l'exponentielle $\exp\left[-\frac{\lambda}{2}(r_1+r_2-\frac{r_3}{2})\right]$

Nous allons essayer de remédier à ce dernier inconvénient en développant une deuxième méthode pour construire la fonction d'onde. Malheureusement nous ne pourrons plus employer les polynômes étudiés au chapitre IV.

VI - 3 - DEUXIEME DEVELOPPEMENT DE LA FONCTION D'ONDE

Dans ce deuxième développement de la fonction d'onde de l'atome de lithium, nous nous attacherons à mieux représenter la configuration $1s^2\ 2s$ de l'état fondamental.

En suivant la méthode exposée au paragraphe précédent nous devons remplacer $e^{-\frac{S}{2}}$ qui figure dans $\varphi\,[21]$ 1 dans la relation (11) par la quantité entièrement symétrique.

$$\left[e - \frac{\lambda}{2}\left(r_1 + r_2 + \frac{r_3}{2}\right) + e - \frac{\lambda}{2}\left(r_2 + r_3 + \frac{r_1}{2}\right) + e - \frac{\lambda}{2}\left(r_3 + r_1 + \frac{r_2}{2}\right)\right]$$

que nous écrivons à l'aide de S, r et φ

$$\left[e - \frac{S}{2}\left(-\frac{1}{3}\, r\cos\varphi + \frac{5}{6}\right) + e - \frac{S}{2}\left(\frac{1}{6}\, r\cos\varphi - \frac{1}{2\sqrt{3}}\, r\sin\varphi + \frac{5}{6}\right)\right.$$
$$\left. + e - \frac{S}{2}\left(\frac{1}{6} r\cos\varphi + \frac{1}{2\sqrt{3}}\, r\sin\varphi + \frac{5}{6}\right)\right]$$

La forme des exponentielles devient alors compliquée et rend les calculs difficiles.

Nous préférerons utiliser directement les variables r_i et r_{ij} ; pour former les fonctions des variables radiales possédant les symétries désirées nous emploierons les opérateurs étudiés au chapitre II. Notre méthode s'applique aussi bien aux états doublets qu'aux états quadruplets.

a - Construction de la fonction d'onde

Nous nous limiterons aux états S pour éviter l'intervention des angles d' EULER.

La fonction des variables radiales de l'état quadruplet est une fonction antisymétrique. Nous savons construire une telle fonction en faisant agir l'opérateur.

$$O\left[1^3\right] = \frac{1}{6}\left[1 - P_{12} - P_{23}\right]\left[1 - P_{13}\right] \qquad (20)$$

sur une fonction sans symétrie. L'action de cet opérateur sur une fonction symétrique ou sur une fonction de symétrie intermédiaire donne zéro comme l'indique le tableau donné au chapitre II.

Au chapitre II nous avons montré qu'une fonction quelconque peut se mettre sous la forme suivante.

$$F = \alpha f\left[3\right] + \beta f\left[1^3\right] + \gamma f\left[21\right]1 + \delta f\left[21\right]2$$

où $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ sont des constantes (21)

Nous formons la fonction des variables radiales de l'état quadruplet

$$\Psi\left[1^3\right] = O\left[1^3\right] F = \beta f\left[1^3\right] \qquad (22)$$

La fonction des variables radiales de l'état doublet possède la symétrie intermédiaire. Pour construire ces fonctions, nous disposons d'après les résultats du chapitre II de quatre opérateurs.

$$O_i\left[21\right]\nu \qquad (i = 1,2 \; ; \quad \nu = 1,2)$$

Les fonctions de l'état doublet appartiennent à la symétrie $\left[21\right]1$ ou $\left[21\right]2$ à cause de la dégénérescence d'ordre deux. Nous pouvons profiter de ce fait pour simplifier les calculs numériques en combinant les quatre opérateurs $O_i\left[21\right]\nu$

Nous formons aussi un nouvel opérateur qui s'exprime simplement en fonction des P_{ij} Nous le désignons par $O\,[21]$

$$O\,[21] = \frac{1}{2}\left[O_1\,[21]\,1 - O_2\,\,[21]\,2\,\right] + \frac{\sqrt{3}}{2}\left[\,O_1\,\,[21]\,2 + O_2\,[21]\,1\right]$$

$$= \frac{1}{3}\left[\,2 - P_{12}\,\,P_{13}\,\,\,- P_{23}\,\,P_{13}\right] \qquad (23)$$

L'action de cet opérateur est nulle sur les fonctions symétriques et antisymétriques, tandis que

$$O\,[21]\;\; f\;[21]\,1 \;=\; f\;[21]\;1$$

$$O\,[21]\;\; f\;[21]\,2 \;=\; f\;[21]\;2 \qquad (24)$$

En faisant agir $O\,[21]$ sur F nous obtenons

$$\psi\,[21] \;=\; O\,[21]\;F \;=\; \gamma\; f\,[21]\;1 \;\;+\;\; \delta\; f\;\,[21]\;2$$

Cette dernière fonction peut servir à décrire l'état doublet car l'énergie est dégénérée d'ordre deux pour les fonctions de symétrie intermédiaire.

Nous devons choisir une fonction F adaptée à décrire la configuration $1s^2\,2s$. Nous mettrons en facteur l'exponentielle $e^{-ar_2 - b(r_1+r_3)}$ où a et b sont des paramètres, nous multiplierons cette exponentielle par une série de puissances de r_i et de r_{ij} La fonction F sans symétrie déterminée sera

$$F = e^{-ar_2 - b\,(r_1+r_3)} \sum_{l\,m\,n\,p\,q\,r} A^{p\,q\,r}_{l\,m\,n}\;\; r_1^{\,l}\; r_2^{\,m}\; r_3^{\,n}\; r_{12}^{\,p}\; r_{23}^{\,q}\; r_{31}^{\,r} \qquad (26)$$

$$\psi\,[21] \;\;=\;\; O\;[21]\;\;F$$

b - Equation de SCHRÖDINGER

Nous allons déterminer quelques opérateurs qui vont simplifier la présentation de l'équation de SCHRÖDINGER.

A partir des deux opérateurs $O\,[1^3]$ et $O\,[21]$

nous définissons les deux autres opérateurs

$$L_A = 6\, e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)} \; O\left[1^3\right] \; e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)}$$

$$L_I = 6\, e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)} \times O\left[21\right] e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)} \qquad (27)$$

On vérifie la relation suivante

$$L_i \left[H + \frac{a+b}{2} S - \frac{a-b}{2} U - \frac{a^2 + 2b^2}{2} \right]$$

$$= 6\, e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)} \; O_i \; H\, e^{-a r_2 - b (r_1 + r_3)} \qquad (28)$$

$$Li = \begin{vmatrix} L_A \\ L_I \end{vmatrix} \qquad O_i = \begin{vmatrix} O\left[1^3\right] & \text{pour les états quadruplets} \\ O\left[21\right] & \text{pour les états doublets.} \end{vmatrix}$$

Les opérateurs S et U sont donnés par

$$S = \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{\partial}{\partial r_3} + \frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2} + \frac{1}{r_3}$$

$$U = \frac{\partial}{\partial r_3} + \frac{\partial}{\partial r_1} - \frac{\partial}{\partial r_2} + \frac{1}{r_3} + \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \qquad (29)$$

Nous faisons le changement suivant

$$-\frac{a^2 + 2b^2}{2} = \begin{vmatrix} E_A & \text{pour l'état quadruplet} \\ E_I & \text{pour l'état doublet} \end{vmatrix} \qquad (30)$$

L'équation de SCHRODINGER des états de symétrie i se réduit à

$$Li \left[H + \frac{a+b}{2} S - \frac{a-b}{2} U \right] F = O \qquad (31)$$

c - Energie de l'état fondamental

Pour effectuer les calculs numériques nous remplaçons les paramètres a et b par les paramètres λ et k définis par les relations suivantes

$$a = b\lambda \qquad b = k \qquad k r_i = \rho_i$$

$$\text{Alors} \quad E = -k^2 \quad \frac{2 + \lambda^2}{2} \tag{32}$$

Définissons deux nouveaux opérateurs

$$A = L \left(T + \frac{\lambda + 1}{2} S - \frac{\lambda - 1}{2} U \right) \tag{33}$$

$$B = -L V$$

T est l'opérateur énergie cinétique, V l'opérateur potentiel après avoir fait le changement d'unité de longueur précédent. D'où pour l'un ou l'autre des états l'équation homogène en F

$$\left[A k - B \right] \quad F \quad = O \tag{34}$$

La résolution numérique peut être faite à partir de là à un ordre d'approximation donné par le nombre de composantes non nulles de F selon les fonction f_i choisies pour approcher F. Pour chaque valeur de λ on obtient un système linéaire algébrique dont les inconnues sont les composantes de F, la valeur k étant donnée par la plus grande racine du déterminant.

$$F = \sum_i c_i \quad f_i$$

$$\sum C_i \quad (A_{ji} k - B_{ji}) = O$$

$$A_{ji} = \langle f_j \left| A \right| f_i \rangle \, , \; B_{ji} = \langle f_j \left| B \right| f_i \rangle \tag{35}$$

Les produits scalaires sont à effectuer dans l'espace de configuration des électrons avec l'élément de volume qui s'y rapporte. Les matrices (A) et (B) sont symétriques et dépendent de λ Elles sont différentes suivant que l'on traite l'état quadruplet ou l'état doublet.

Nous avons effectué un calcul pour l'état fondamental avec diverses fonctions de base. Les résultats obtenus sont donnés dans le tableau suivant.

Fonctions de base f_i	λ	K	E (en u a)
Constante	0,3	2,453	- 6,28
P_2	0,3	2,603	- 7,08
Cte P_2	0,3	2,631	- 7,23
Cte P_1 P_2	0,3	2,633	- 7,24
Cte P_1 P_2 P_3	0,3	2,636	- 7,26

d - Conclusion

En comparant ce calcul avec notre premier calcul nous voyons que nous avons amélioré la valeur du niveau fondamental, ceci provient du fait que la modification de l'exponentielle a amené une meilleure représentation de l'état $1s^2$ 2 s

Cependant nous ne pouvons pas comparer nos résultats avec les calculs déjà publiés faisant intervenir le même nombre de paramètres.

Pour obtenir des résultats comparables, il faudrait prendre un plus grand nombre de paramètres mais le volume des calculs à effectuer croît très rapidement.

Nos calculs montrent quand même que l'on peut systématiser la construction des fonctions d'onde de symétrie déterminée aussi que la résolution de l'équation de SCHRODINGER. On aboutit ainsi à la résolution d'un système linéaire qui simplifie un peu la masse de calculs à effectuer.

CONCLUSION

Nous avons montré, dans notre travail, qu'on pouvait manier, sans trop de difficultés, les symétries des problèmes de trois et quatre corps à masses égales. Pour cela nous avons utilisé des résultats de la théorie des groupes symétriques et nous avons introduit des éléments nouveaux.

Nous avons classé, suivant leurs diverses symétries, les fonctions des variables radiales du triton et de la particule α. Notre méthode diffère un peu des méthodes employées par DERRICK et COHEN pour traiter les mêmes problèmes. Elle est facile à étendre aux états et aux valeurs du moment angulaire total que l'on rencontre dans les problèmes de diffusion de trois et quatre nucléons.

Nous avons également appris à former des fonctions possédant les diverses symétries.

Une méthode simple consiste à faire agir des opérateurs convenablement choisis, sur une fonction sans symétrie déterminée.

Dans les travaux antérieurs sur les polynômes orthogonaux on ne s'attachait pas à définir des caractères de symétrie. Nous avons réussi à construire des polynômes orthogonaux qui possèdent les trois symétries que l'on rencontre dans le problème de trois corps. On pourra approcher une fonction de symétrie donnée à l'aide de polynômes possédant cette symétrie.

Les méthodes utilisées pour construire des fonctions de diverses symétries sont facilement généralisables.

Dans l'état fondamental du triton, la contribution la plus importante au calcul du niveau d'énergie est apportée par la fonction radiale entièrement symétrique. Cependant les fonctions de symétrie intermédiaire ont une influence non négligeable sur le calcul du niveau d'énergie. Avec le potentiel que nous avons choisi, cette influence est de l'ordre de 6 % de l'énergie totale ; elle est du même ordre pour l'énergie coulombienne de H_e^3. Il est évident que cette valeur dépend de la forme du potentiel et de la valeur relative des termes d'échange, mais un fait subsiste : quand on calcule à l'aide de la fonction d'onde, il ne faut pas oublier la composante radiale de symétrie intermédiaire, son action peut ne pas être négligeable.

Nous avons employé deux formes différentes de la fonction d'onde pour calculer le niveau fondamental de l'atome de lithium. La première, qui utilise les polynomes du chapitre IV décrit assez mal la configuration $1s^2\ 2s$ de l'état fondamental ; la deuxième qui fait appel aux opérateurs du chapitre II pour former les fonctions de symétrie intermédiaire donne de meilleurs résultats. Nous montrons par ces deux méthodes que l'on peut former, d'une manière systématique, les fonctions des variables radiales des états doublet et quadruplet de l'état S.

Le niveau fondamental du lithium que nous avons calculé n'est pas comparable, à nombre égal de paramètres dans la fonction d'onde, aux résultats déjà publiés. Imposant une relation entre l'énergie et un paramètre, nous diminuons le nombre de paramètres disponibles et par conséquent nous obtenons de moins bons résultats.

APPENDICE I REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DES GROUPES SYMETRIQUES DE DEGRES 3 et 4

partitions du nombre 3 \ transpositions	identité	(12)	(23)
[3]	1	1	1
[21]	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$
$[1^3]$	1	-1	-1

Partitions du nombre 4 \ Transpositions	identité	(12)	(23)	(34)
[4]	1	1	1	1
$[1^4]$	1	-1	-1	-1
[22]	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
[3 1]	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$
$[2\,1^2]$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{3} & \frac{2\sqrt{2}}{3} & 0 \\ \frac{2\sqrt{2}}{3} & -\frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$

TABLES DES CARACTERES DES GROUPES SYMETRIQUES S_3 ET S_4

S_3

Classe	1^3	12	3
Ordre de la Classe	1	3	2
Représentations irréductibles $[3]$	1	1	1
Représentations irréductibles $[21]$	2	0	-1
Représentations irréductibles $[1^3]$	1	-1	1

S_4

Classe	1^4	$1^2 2$	13	4	2^2
Ordre de la classe	1	6	8	6	3
Représentations irréductibles $[4]$	1	1	1	1	1
Représentations irréductibles $[31]$	3	1	0	-1	-1
Représentations irréductibles $[2^2]$	2	0	-1	0	2
Représentations irréductibles $[21^2]$	3	-1	0	1	-1
Représentations irréductibles $[1^4]$	1	-1	1	-1	1

APPENDICE III

DECOMPOSITION DES PRODUITS TENSORIELS DES REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DE S_3 et S_4

Notation : Pour $F^h \otimes F^g \simeq n_i^{hg} F^i$ nous noterons

$$[h] \otimes [g] \simeq n_i^{gh} [i]$$

Nous omettons dans les tableaux ci-dessous les produits

$$[n] \otimes [\lambda] \simeq [\lambda] \qquad \text{et} \qquad [1^n] \otimes [1^n] \simeq [n]$$

Les tableaux doivent être lus de la manière suivante

$$[21] \otimes [21] \simeq [3] + [21] + [1^3]$$

S_3

	$[3]$	$[21]$	$[1^3]$
$[21] \otimes [21]$	1	1	1
$[21] \otimes [1^3]$		1	

S_4

	$[4]$	$[31]$	$[22]$	$[21^2]$	$[1^4]$
$[31] \otimes [31]$	1	1	1	1	
$[31] \otimes [22]$		1		1	
$[31] \otimes [21^2]$		1	1	1	1
$[31] \otimes [1^4]$				1	
$[22] \otimes [22]$	1		1		1
$[22] \otimes [21^2]$		1		1	
$[22] \otimes [1^4]$			1		
$[21^2] \otimes [21^2]$	1	1	1	1	
$[21^2] \otimes [1^4]$		1			

APPENDICE IV - POLYNOMES DE SYMETRIE DEFINIE

DEVELOPPEMENT EN SERIE DE POLYNOMES D'APPELL ET KAMPE DE FERIET

Degré	Type de Symétrie	Valeur propre de l'opérateur du 2° ordre	Valeur propre de l'opérateur du 4° ordre	
0	[3]	0	0	F_{∞}
1	[21] 1	- 3	6	$-F_{10} - F_{01}$
1	[21] 2	- 3	6	$F_{10} - F_{01}$
2	[3]	- 8	48	$F_{20} - F_{11} + F_{02}$
2	[21] 1	- 8	36	$-F_{20} + 4F_{11} - F_{02}$
2	[21] 2	- 8	36	$F_{20} - F_{02}$
3	[3]	- 15	90	$2F_{03} + 2F_{30} - 3F_{21} - 3F_{12}$
3	$[1^3]$	- 15	138	$F_{21} - F_{12}$
3	[21] 1	- 15	162	$-F_{30} - F_{03}$
3	[21] 2	- 15	162	$F_{30} - F_{03} - 2F_{21} + 2F_{12}$

APPENDICE V - POLYNOMES DE SYMETRIE DEFINIE

DEVELOPPEMENT EN SERIE DE POLYNOMES NORMES DE MUNSCHY et PLUVINAGE

Degré	Type de Symétrie	Valeur propre de l'opérateur du 2° ordre	Valeur propre de l'opérateur du 4° ordre	
0	[3]	0	0	F^{+}_{oo}
1	[21] 1	- 3	6	F^{+}_{10}
1	[21] 2	- 3	6	F^{+}_{11}
2	[3]	- 8	48	$\frac{\sqrt{5}}{3} F^{+}_{20} + \frac{2}{3} F^{+}_{22}$
2	[21] 1	- 8	36	$\frac{2}{3} F^{+}_{20} - \frac{\sqrt{5}}{3} F^{+}_{22}$
2	[21] 2	- 8	36	F^{+}_{21}
3	[3]	- 15	90	$\frac{1}{\sqrt{6}} F^{+}_{30} - \sqrt{\frac{5}{6}} F^{+}_{32}$
3	$[1^3]$	- 15	138	$\sqrt{\frac{7}{10}} F^{+}_{31} - \sqrt{\frac{3}{10}} F^{+}_{33}$
3	[21] 1	- 15	162	$\sqrt{\frac{5}{6}} F^{+}_{30} + \frac{1}{\sqrt{6}} F^{+}_{32}$
3	[21] 2	- 15	162	$\sqrt{\frac{3}{10}} F^{+}_{31} + \sqrt{\frac{7}{10}} F^{+}_{33}$

APPENDICE VI - POLYNOMES DE SYMETRIE DEFINIE

DEVELOPPEMENT SOUS LA FORME TRIGONOMETRIQUE

Degré	Type de Symétrie	V.P. de $K^{(2)}$	V.P. de $K^{(4)}_{\beta}$	
0	[3]	0	0	1
1	[21] 1	- 3	$-\frac{3}{4}$	$r\cos\varphi$
1	[21] 2	- 3	$-\frac{3}{4}$	$r\sin\varphi$
2	[3]	- 8	0	$1 - 4r^2$
2	[21] 1	- 8	- 12	$r\cos\varphi \quad -\frac{5}{2}r^2\cos 2\varphi$
2	[21] 2	- 8	- 12	$r\sin\varphi \quad +\frac{5}{2}r^2\sin 2\varphi$
3	[3]	- 15	$-\frac{315}{4}$	$1 - \frac{15}{2}r^2 + \frac{35}{4}r^3\cos 3\varphi$
3	$[1^3]$	- 15	$-\frac{123}{4}$	$r^3\sin 3\varphi$
3	[21] 1	- 15	$-\frac{27}{4}$	$r(1-\frac{7}{2}r^2)\cos\varphi + r^2\cos 2\varphi$
3	[21] 2	- 15	$-\frac{27}{4}$	$r(1-\frac{7}{2}r^2)\sin\varphi - r^2\sin 2\varphi$
4	[3]	- 24	0	$1 - 12r^2 - 16r^3\cos 3\varphi + 36r^4$
4	[21] 1	- 24	$6(-17+\sqrt{193})$	$r(1-\frac{79}{18}r^2)\cos\varphi - \frac{r^2}{18}(21-109r^2)\cos 2\varphi + \frac{19}{72}r^4\cos 4\varphi + \frac{\sqrt{193}}{18}\left[r^3\cos\varphi - r^2(2-5r^2)\cos 2\varphi - \frac{13}{4}r^4\cos 4\varphi\right]$

Degré	Type de Symétrie	V.P. de $K^{(2)}$	V.P. de $K^{(4)}_{\beta}$	
4	$[21]$ 2	- 24	$6(-17+\sqrt{193})$	$r(1-\frac{79}{18}r^2)\sin\varphi + \frac{r^2}{18}(31-109r^2)\sin 2\varphi + \frac{19}{72}r^4\sin 4\varphi + \frac{\sqrt{193}}{18}\left[r^3\sin\varphi + r^2(2-5r^2)\sin 2\varphi - \frac{13}{4}r^4\sin 4\varphi\right]$
4	$[21]$ 1	- 24	$6(-17-\sqrt{193})$	$r(1-\frac{79}{18}r^2)\cos\varphi - \frac{r^2}{18}(31-109r^2)\sin 2\varphi + \frac{19}{72}r^4\cos 4\varphi - \frac{\sqrt{193}}{18}\left[r^3\cos\varphi - r^2(2-5r^2)\cos 2\varphi - \frac{13}{4}r^4\cos 4\varphi\right]$
4	$[21]$ 2	- 24	$6(-17-\sqrt{193})$	$r(1-\frac{79}{18}r^2)\sin\varphi + \frac{r^2}{18}(31-109r^2)\sin 2\varphi + \frac{19}{72}r^4\sin 4\varphi - \frac{\sqrt{193}}{18}\left[r^3\sin\varphi + r^2(2-5r^2)\sin 2\varphi - \frac{13}{4}r^4\sin 4\varphi\right]$
5	$[3]$	- 35	$-\frac{1155}{4}$	$1-\frac{35}{2}r^2 + \frac{35}{4}r^3\cos 3\varphi + \frac{105}{2}r^4 - \frac{385}{8}r^5\cos 3\varphi$
5	$[1^3]$	- 35	$-\frac{3}{4}$	$r^3(1-\frac{5}{2}r^2)\sin 3\varphi$
5	$[21]$ 1	- 35	$\frac{3}{4}(-257 + 64\sqrt{19})$	$(1-\frac{210}{31}r^2 + \frac{176}{31}r^4)\cos\varphi - \frac{4r^2}{31}(19-103r^2)\cos 2\varphi - \frac{32}{31}r^4\cos 4\varphi - \frac{1397}{155}r^5\cos 5\varphi - 6\sqrt{\frac{19}{31}}\left[r^3(3-22r^2)\cos\varphi - 2r^2(3-13r^2)\cos 2\varphi + 4r^4\cos 4\varphi - \frac{77}{10}r^5\cos 5\varphi\right]$

Degré	Type de Symétrie	V.P. de $K^{(2)}$	V.P de $K^{(4)}$	
5	$[21]$ 2	-35	$\frac{3}{4}(-257+64\sqrt{19})$	$r(1-\frac{210}{31}r^2+\frac{176}{31}r^4)\sin\varphi+\frac{4}{31}r^2(19-103r^2)\sin 2\varphi$ $-\frac{32}{31}r^4\sin 4\varphi+\frac{1397}{155}r^5\sin 5\varphi$ $-6\sqrt{\frac{19}{31}}\left[r^3(3-22r^2)\sin\varphi\right.$ $+2r^2(3-13r^2)\sin 2\varphi+4r^4\sin 4\varphi$ $\left.+\frac{77}{10}r^5\sin 5\varphi\right]$
5	$[21]$ 1	-35	$3(-257-64\sqrt{19})$	$r(1-\frac{210}{31}r^2+\frac{176}{31}r^4)\cos\varphi-$ $-\frac{4}{31}r^2(19-103r^2)\cos 2\varphi-32r^4\cos 4\varphi$ $-\frac{1397}{155}r^5\cos 5\varphi+6\sqrt{\frac{19}{31}}\left[r^3(3-22r^2)\right.$ $\cos\varphi-2r^2(3-13r^2)\cos 2\varphi$ $\left.+4r^4\cos 4\varphi-\frac{77}{10}r^5\cos 5\varphi\right]$
5	$[21]$ 2	-35	$3(-257-64\sqrt{19})$	$r(1-\frac{210}{31}r^2+\frac{176}{31}r^4)\sin\varphi+\frac{4}{31}r^2(19-103r^2)$ $\sin 2\varphi$ $-\frac{32}{31}r^4\sin 4\varphi+\frac{1397}{155}r^5\sin 5\varphi$ $+6\sqrt{\frac{19}{31}}\left[r^3(3-22r^2)\sin\varphi+2r^2(3-13r^2)\right.$ $\left.\sin 2\varphi+4r^4\sin 4\varphi+\frac{77}{10}r^5\sin 5\varphi\right]$

APPENDICE VII

CALCUL DE L'INTEGRALE $(l, m) = \iint_{T_2} r^l \cos m\varphi \; r\,dr\,d\varphi$

Pour évaluer cette intégrale nous partons de l'intégrale

$$I(l, m) = \iint_{T_2} r^l e^{im\varphi} \, r\,dr\,d\varphi = R + iJ$$

Intégrons sur r

Nous aboutissons à la relation

$$I(l, m) = \frac{(-1)^m}{2^{l+2}(l+2)} \left[1 + 2\cos\frac{2m\pi}{3}\right] \int_{-\frac{\pi}{3}}^{\frac{\pi}{3}} d\varphi \; e^{im\varphi} \left[\frac{1}{\cos\varphi}\right]^{l+2}$$

la fonction $\sin m\varphi \left[\frac{1}{\cos\varphi}\right]^{l+2}$ est impaire. Donc $J = 0$

$$R = (l, m) = \frac{(-1)^m}{2^{l+1}(l+2)} \left[1 + 2\cos\frac{2m\pi}{3}\right] \int_0^{\frac{\pi}{3}} \cos m\varphi \; d\varphi \left[\frac{1}{\cos\varphi}\right]^{l+2}$$

L'intégrale $M(l, m) = \int_0^{\frac{\pi}{3}} \frac{\cos m\varphi}{\left[\cos\varphi\right]^{l+2}} \, d\varphi$ se calcule à l'aide de deux formules de récurrence

$$M(l, m) = 2M(l-1, m-1) - M(l, m-2)$$

que l'on déduit de la relation

$$\cos m\varphi = 2\cos\varphi \cos(m-1)\varphi - \cos(m-2)\varphi$$

et $M(l, 1) = M(l-1, 0)$

Nous utiliserons également dans la suite les intégrales

$$\underline{(l, m)} = \iint_{T_2} r^l \cos m\varphi \; (1 - 3r^2 + 2r^3 \cos 3\varphi) \, r\,dr\,d\varphi$$

$$\underline{\underline{(l, m)}} = \iint_{T_2} r^l \cos m\varphi \; (1 - 3r^2 + 2r^3 \cos 3\varphi)^2 \, r\,dr\,d\varphi$$

qui sont reliées entre elles par les relations

$$\underline{(l, m)} = (l, m) - 3(l+2, m) + (l+3, m+3) + (l+3, m-3)$$

$$\underline{\underline{(l, m)}} = \underline{(l, m)} - 3\underline{(l+2, m)} + \underline{(l+3, m+3)} + \underline{(l+3, m-3)}$$

APPENDICE VIII - TABLEAU DONNANT LES PREMIERES INTEGRALES (l, m) NON NULLES

Valeur des indices l et m	$\frac{1}{3\sqrt{3}}$ (l, m)	$\frac{1}{3\sqrt{3}}$ (l, m)	$\frac{1}{3\sqrt{3}}$ (l, m)
0 0	$\frac{1}{4}$	$\frac{9}{80}$	$\frac{81}{1120}$
2 0	$\frac{1}{16}$	$\frac{9}{560}$	$\frac{81}{11\,200}$
3 3	$\frac{1}{40}$	$\frac{9}{2240}$	$\frac{81}{61\,600}$
4 0	$\frac{1}{40}$	$\frac{9}{2240}$	$\frac{81}{61\,600}$
5 3	$\frac{1}{70}$	$\frac{9}{5600}$	non calculée
6 0	$\frac{29}{2240}$	$\frac{171}{123\,200}$	"
6 6	$\frac{1}{112}$	$\frac{9}{12\,320}$	"
7 3	$\frac{1}{112}$	$\frac{9}{12\,320}$	"
8 0	$\frac{11}{1400}$	non calculée	"
8 6	$\frac{1}{160}$	"	"
9 3	$\frac{37}{6160}$	"	"
9 9	$\frac{1}{220}$	"	"
10 0	$\frac{13}{2464}$	"	"
10 6	$\frac{1}{220}$	"	"

BIBLIOGRAPHIE

1. TRITON

101 E.P. WIGNER - Phys. Rev. 43, 252, 1933
102 H.S.W. MASSEY et C.B.O. MOHR - Proc. Roy Soc. A 152, 693, 1935
103 E. FEENBERG - Phys. Rev. 47, 850, 1935
104 L.H. THOMAS - Phys. Rev. 47, 903, 1935
105 E. FEENBERG et J.K. KNIPP - Phys. Rev. 48, 906, 1935
106 E. FEENBERG - Phys. Rev. 49, 273, 1936
107 E. FEENBERG - et S. SHARE - Phys. Rev. 50, 253, 1936
108 R.D. PRESENT - Phys. Rev. 50, 635, 1936
109 G. BREIT et E. FEENBERG - Phys. Rev. 50, 850, 1936
110 L. SCHIFF - Phys. Rev. 50, 1090 et 1191, 1936
111 S. FLÜGGE - Z. für Physik - 105, 522, 1937
112 W. RARITA et R.D. PRESENT - Phys. Rev. 51, 788, 1937
113 H. MARGENAU et D.T. WARREN - Phys. Rev. 52, 790 et 1027, 1937
114 F.W. BROWN - Phys. Rev. 56, 1107, 1939
115 E. GERGOY et J. SCHWINGER - Phys. Rev. 61, 138, 1942
116 N. SVARTHOLM - Thèse Lund 1945
117 H. FRÖLICH et K. HUANG - Proc. Roy Soc. A 191, - 61, 1947
118 M. GOEPPERT - MAYER et R.G. SACHS - Phys. Rev. 73, 185, 1947
119 H. FESCHBACH et W. RARITA - PR 75, 1384, 1949
120 R.E. CLAPP - Phys. Rev. 76, 873, 1949
121 M. VERDE - Helv. Phys. Acta, 22, 339, 1949
122 M. VERDE - Helv. Phys. Acta, 23, 453, 1950
123 T.M. HU et K.N. HSU - Phys. Rev. 78, 633, 1950
124 J. IRVING - Phil. Mag., 42, 338, 1951
125 S.I. RUBINOW - Phys. Rev., 86, 388, 1952
126 R.L. PEASE et H. FESCHBACH - Phys. Rev., 88, 945, 1952
127 J.M. BLATT et V.F. WEISKOPF - Theoretical Nuclear Physics - Wiley 1952
128 R.G. SACHS - Nuclear Theory - Addison Wesley, 1953
129 H. FESCHBACH et S.I. RUBINOW - Phys. Rev. 98, 188, 1955
130 P. GELBARD - Phys. Rev. 100; 1530, 1955
131 G. ABRAHAM, L. COHEN et A.S. ROBERTS - Proc. Phys. Soc. A 68, 265, 1955
132 B. HOLMBERG - Kungl. Fysiograph. Sälls, 26, 1, 1956
133 T. KIKUTA, M. MORITA et M. YAMADA - Progr. Theor. Phys. 15, 222, 1956
134 G. SKORNYAKOV et TER-MARTYROSIAN-Physica, 22, 1169, 1956

135 M. VERDE - Handbuch der Physik, B 39, Springer-Berlin 1957
136 T. OHMURA, M. MORITA, M. YAMADA - Progr. Theor. Phys. 17, 326, 1957
137 J. FUJITA, H. MIYAZAWA - Progr. Theor. Phys. 17, 360, 1957
138 W. BRENIG - Nucl. Phys. 4, 363, 1957
139 G. DERRICK et J.M. BLATT - Nucl. Phys. 8, 310, 1958
140 J.M. BLATT et G. DERRICK - Nucl. Phys. 8, 602, 1958
141 H.J. MANG et W. WILD - Z. für Physik, 154, 182, 1959
142 T. OHMURA - Progr. Theor. Phys. 22, 34, 1959
143 B.W. DOWNS et R.H. DALITZ - Phys. Rev. 114, 593, 1959
144 L. EYGES - Phys. Rev. 115, 1643, 1959
145 G.H. DERRICK - Nucl. Phys. 16, 405, 1960
146 G.H. DERRICK - Nucl . Phys. 17, 67, 1960
147 G.H. DERRICK - Nucl. Phys. 18, 308, 1960
148 C. WERNTZ - PR 121, 849, 1960
149 G. DERRICK et D.MUSTARD - PR letters 6, 69, 1961
150 R.E. CLAPP Annals of Physics 13 - 187, 1961
151 G.A. BAKER, J.L. GAMMEL, B.J. HILL, J.G. WILLS PR 125, 1754, 1962

2. PARTICULE α

201 E. FEENBERG et S. SHARE - Phys. Rev. 50, 253, 1936
202 W. RARITA et R.D. PRESENT - Phys. Rev. 51, 788, 1937
203 H. MARGENAU et D.T. WARREN - Phys. Rev. 52, 790 et 1027, 1937
204 P. GERJOY et J. SCHWINGER - Phys. Rev. 61, 138, 1942
205 N. SVARTHOLM - Thèse Lund 1945
206 H. FRÖLICH et K. HUANG - Proc. Roy Soc. A 191, 61, 1947
207 J. IRVING - Phil. Mag. 42, 338, 1951
208 J. IRVING - Proc. Phys. Soc. A 66, 17, 1953
209 G. ABRAHAM, L. COHEN et A.S. ROBERTS - Proc. Phys. Soc. A 68, 265, 1955
210 W. BRENIG - Nucl. Phys. 4, 363, 1957
211 H.J. MANG et W. WILD - Z. für Physik, 154, 182, 1959
212 M.H. WANG et H.L. TSAO - Sc. Records (Chine) 3, 112, 1959
213 L. COHEN et J.B. WILLIS - Nucl. Phys. 19, 125, 1959
214 L. COHEN - Nucl. Phys. 20, 690, 1960
215 L. COHEN - Nucl. Phys. 22, 492, 1961

3 GROUPE SYMETRIQUE

301 A. MESSIAH - Mécanique Quantique (Appendice D) -Dunod - Paris, 1960
302 D.E. RUTHERFORD - Substitutional Analysis- University Press Edinburgh, 1948
303 D.E. LITTLEWOOD - The theory of group character - Clarendon Press Oxford, 1958
304 E.P. WIGNER - Group Theory - Academic Press - New York, 1959

305 A.R. EDMONDS - Angular Momentum in quantum mechanics
Princeton University Press, 1957

4. POLYNOMES ORTHOGONAUX

401 P. APPELL et J. KAMPE de FERIET - Fonctions hypergeométriques et hypersphériques - Gauthier Villars - Paris 1926
402 L. KOSCHMIEDER - Tecnica - Revista Fac. Ci de Tucuman 1, 173, 1951
403 A. ERDELYI - Higher transcendental functions - Vol. II - Mc Graw Hill Book C° - New York, 1953
404 A. KOSCHMIEDER - Revista Mat. y Fisica Teorica, 10, 151, 1955
405 G. MUNSCHY- Comptes Rendus 243, 767, 1956
406 G. MUNSCHY - et P. PLUVINAGE - J. Phys. Rad. 18, 157, 1957
407 G. MUNSCHY - J. Phys. Rad. 18, 552, 1957
408 L. KOSCHMIEDER - Revista Mat. Hispano Americana 17, 1, 1957
409 J. PRORIOL - Comptes Rendus 245, 2459, 1957
410 G. MUNSCHY - Thèse - Strasbourg, 1958
411 G. MUNSCHY - P. PLUVINAGE et J. PRORIOL - J. Phys. Rad. 21, 85, 1960

5. ATOME DE LITHIUM

501 E.B. WILSON - J. Chem. Phys. 1, 210, 1933
502 K. HUANG - PR 70, 197, 1946
503 P. WALSH et S. BOROWITZ PR 115, 1206, 1959

TABLE DES MATIÈRES

INTRODUCTION 1

CHAPITRE I

TRAVAUX ANTERIEURS

1. Classification des fonctions d'onde du triton et de la particule α 5
2. Calculs numériques sur le triton 7
3. Polynômes orthogonaux dans le triangle 9
4. Atome d'hélium 9

CHAPITRE II

THEORIE DES GROUPES SYMETRIQUES 11

1. Groupe symétrique - Représentation du groupe . . . 11
2. Représentations irréductibles du groupe symétrique S_n 13
3. Caractères du groupe symétrique 15
4. Réduction d'une représentation 16
5. Fonctions propres d'un opérateur invariant. Théorème de WIGNER 17
6. Symétrie des fonctions 19
7. Réduction de la représentation régulière 20
8. Produit tensoriel de deux représentations 23
9. Fonctions de spin-charge de 3 et 4 nucléons 24

CHAPITRE III

CLASSIFICATION DES FONCTIONS D'ONDE DU TRITON ET DE LA PARTICULE α. 27

1. Principe de construction des fonctions des variables d'espace 27
2. Formation des fonctions des différents états du triton 30

3. Formation des fonctions des différents états de la particule α 36

CHAPITRE IV

FONCTIONS DE BASE DE SYMETRIE DEFINIE POUR LES FONCTIONS D'ONDE D'UN SYSTEME DE TROIS PARTICULES IDENTIQUES . . . 40

1. Choix des variables 41
2. Méthode directe de formation des fonctions 44
3. Formation de polynômes à l'aide d'un opérateur . . . 45
   a) Opérateur d'APPELL et KAMPE de FERIET . . .
   b) Fonctions propres de l'opérateur d'APPELL
   c) Formation des polynômes de symétrie définie.
4. Formation des polynômes à l'aide de deux opérateurs . . 54
   a) Opérateur du 4e ordre . . . . . .
   b) Développement suivant les polynômes d'APPELL ou les polynômes de MUNSCHY-PLUVINAGE . .
   c) Développement des polynômes sous la forme trigonométrique . . . . . .

CHAPITRE V

IMPORTANCE DES SYMETRIES DANS LE CALCUL DE L'ETAT FONDAMENTAL DU TRITON 66

1. Potentiel nucléaire utilisé 66
2. Fonction d'onde - Equations différentielles 67
3. Opérateur énergie cinétique 68
4. Méthodes de calcul numérique 70
5. Importance des symétries dans le calcul de l'état fondamental du triton 71
6. Importance des symétries dans le calcul de l'énergie coulombienne de H_e^3 72

CHAPITRE VI

FONCTIONS D'ONDE APPROCHEES DE SYMETRIE DEFINIE POUR L'ETAT FONDAMENTAL DE L'ATOME DE LITHIUM 74

1. Symétrie des fonctions d'onde 74
2. Développement en fonction de S, r et φ 76
3. Deuxième développement de la fonction d'onde . 83

CONCLUSION 89

APPENDICES 91

BIBLIOGRAPHIE 101

LMD
99, Av. de Saxe, LYON
Dépôt légal - Juin 1962